高等学校教学参考书

固体物理中的格林函数方法

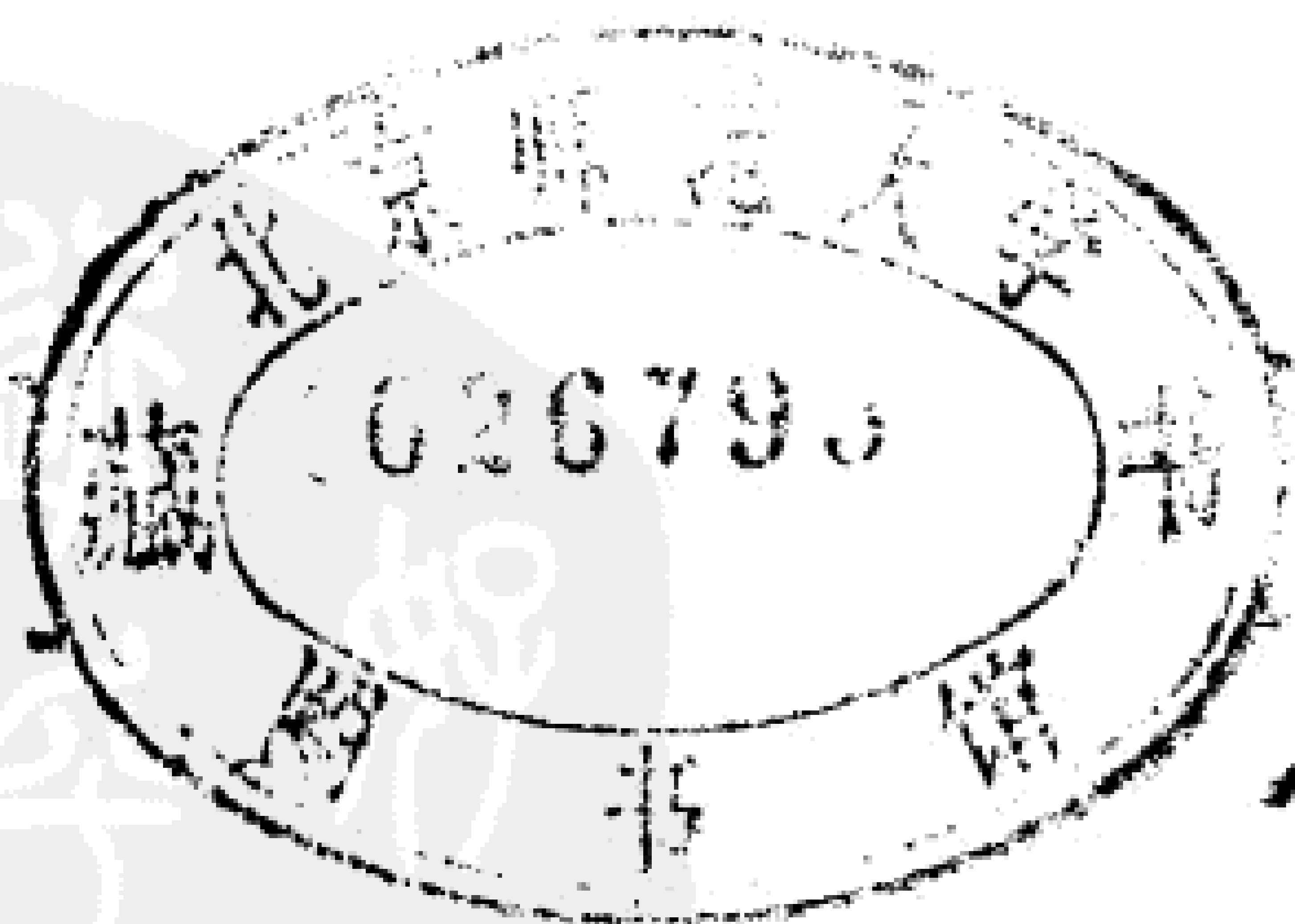
卫崇德　章立源　刘福绥　编著

高等教育出版社

高等学校教学参考书

固体物理中的格林函数方法

卫崇德　章立源　刘福绥 编著



高等教育出版社

（京）112号

高等学校教学参考书

固体物理中的格林函数方法

卫崇德 章立源 刘福绥 编著

*

高等教育出版社出版
新华书店总店北京科技发行所发行
国防工业出版社印刷厂印装

*

开本 850×1168 1/32 印张16.5 字数390 000
1992 年 7月第 1版 1992 年 7月第 1 次印刷
印数 0001—2 211
ISBN 7-04-003274-0/O·994
定价10.25元

出版者前言

为适应高等学校固体物理学及其各分支学科课程教学的需要，高等学校理科物理学教材编审委员会固体物理编审小组和高等教育出版社组织编写了一套固体物理学科的教学参考书，其中包括固体物理学及其各分支学科的基础课程和实验课程用的教学参考书和一部《固体物理学大辞典》．这些书将由高等教育出版社陆续出版．

本书是这套书中的一本．

前　言

从五十年代开始将量子场论中的格林函数方法用于研究统计物理学中的问题．到六十年代后期，格林函数理论已在许多方面取得了重要成就．现在，格林函数方法已成为研究固体物理中具有各种复杂的相互作用的多粒子系统的有力工具．固体物理的许多新发展都和它有关．国外已出了不少专著和为研究生写的教材．国内一些大学也开设了相应的课程．

本书是根据作者多年在北京大学物理系讲授《固体物理学中的格林函数方法》和《超导微观理论》两门课程的讲义加以修改和补充而成．主要介绍多粒子系统的格林函数理论及其在固体物理学中的应用．第一章和第二章介绍格林函数理论的基本原理．第三、四、五章分别介绍相互作用电子气、费密液体理论和电声子相互作用．这些基本相互作用的格林函数理论与固体物理中许多课题都有密切关系．第六章到第十二章介绍固体物理中的一些专题，也是近年来比较活跃的研究领域．其中多数是作者研究工作涉及的领域．包括：固体电导、超导电性、固体的磁性、固体的光学性质、无序系统、Kondo效应、直接统计微扰论及其在变价理论中的应用．这些章节给初学者提供了有关领域中格林函数理论的基础知识，可以作为进一步研究工作的基础或出发点．由于篇幅限制，有些重要的课题没有包括进来．

本书可以作为固体物理研究生第一学年格林函数课程的教材或教学参考书．讲授时可根据具体情况对内容加以选择．书末的习题只供教师和学生参考．对于固体物理工作者和工科院校、师

范院校中与固体物理有关的教师和高年级学生，本书也可以作为了解固体中多粒子理论的基本参考书.

为了方便，本书采用 $\hbar=1$ 的单位制. 温度以能量为单位表示：k_B(Boltzmann 常数)$=1$. 若有例外，书中将有说明.

全书编写分工如下：第一章至第六章及第九章由卫崇德执笔. 第七、八章及第十章由章立源执笔. 第十一、十二章由刘福绥执笔. 由于作者水平有限，错误与不妥之处请读者指正.

作　者

1988.8. 于北京大学

重要符号表

A	磁矢势
$a_{\mathbf{q}}^{+}$	声子产生算符
$a_{\mathbf{q}}$	声子消灭算符
$a_{ns}(d_s, f_s)$	局域电子消灭算符
$C_{\mathbf{k}\alpha}$	产生算符
$C_{\mathbf{k}\alpha}$	消灭算符
$D(x, x')$	声子格林函数，密度相关函数.
E	能量
E_{F}	费密能级
f	分布函数
G	格林函数
$\mathscr{G}$	松原函数
g^2	无量纲电荷
$\hat{H}$	哈密顿量
$\mathbf{H}$	磁场强度
H_c	热力学临界场
$\hat{J}$	电流算符
J	s-d 交换作用积分
$\mathbf{j}$	电流密度
$\mathbf{k}$	波矢
K_0	费密子环
N	粒子数

$\hat{N}$	粒子数算符
$N(0)$	在费密能级处的态密度
$\langle n_{d\uparrow}\rangle$	赝费密子数的平均值
$\hat{O}$	算符
P_N	投影算符
$Q(\omega)$	kondo 效应谱密度
R	电阻
S	S 矩阵
$\mathbf{s}$	自旋
$\mathbf{S}_n$	n 位置自旋算符
$\hat{\mathbf{S}}_+$	n 位置自旋升算符
$\hat{\mathbf{S}}_-$	n 位置自旋降算符
T	温度,编时算符
Tr	阵迹
T_c	超导转变温度
$\hat{U}(t,t_0),\hat{U}(\tau,0)$	时间演化算符
U	局域关联能
V	体积
Z	配分函数
α	自旋
β	自旋, $\beta=1/T$
γ	自旋, 电子-空穴顶角部分
Γ	顶角部分
δ	自旋,穿透深度
Δ	超导能隙
ε	复数介电常数
Θ_D	德拜温度

κ	介电常数
λ	耦合常数
μ	化学势
μ^*	库仑赝势
ξ	相干长度
Π	极化部分
$\rho(\boldsymbol{x})$	电子几率密度
$\hat{\rho}$	统计算符
σ	电导
Σ	自能
τ	寿命，弛豫时间
ϕ	波函数
$\phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})$	传导电子的 Bloch 函数
$\phi_{\mathrm{L}}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_n)$	局域电子波函数空间部分
χ	磁化率
$\chi_s(\mathbf{s})$	单电子自旋函数
ψ	波函数
$\|\Psi\rangle$	态矢量
$\hat{\psi}$	场算符
Ω	热力学势
ω	频率
ω_c	截断频率

目　录

第一章　绝对零度的格林函数

§1.1　相互作用多粒子系统，元激发和准粒子

固体是由电子、离子组成的多粒子系统，它的性质由粒子之间的相互作用决定. 本节先以多电子系统为例说明粒子之间相互作用所产生的效应，然后讨论元激发和准粒子.

一、相互作用电子气

若考虑电子之间的库仑相互作用，则电子系统的哈密顿量是

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_0(i) + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j}^{N} V(i,j) \\
\hat{H}_0 &= \frac{\hat{p}_i}{2m} \qquad\qquad (1.1.1) \\
V(i,\ j) &= \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|}
\end{aligned}
$$

因为电子之间有相互作用，任何电子的运动都与其它电子的运动状态有关，每个电子感受到的势依赖于其它电子的位置，严格讲并不存在单个电子的态. 我们遇到的是一个多体问题，严格求解是非常困难的. 为了讨论相互作用的效应，下面介绍 Hartree-Fock 近似的结果. 电子服从费密统计，将电子系统的波函数写为

$$
\psi(q_1, \cdots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(q_1) & \phi_1(q_2) & \cdots & \phi_1(q_N) \\ \phi_2(q_1) & \phi_2(q_2) & \cdots & \phi_2(q_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \phi_N(q_1) & \phi_N(q_2) & \cdots & \phi_N(q_N) \end{vmatrix}
$$

q 表示坐标和自旋变量，$\phi_i(q)$ 是单电子波函数. $\phi_i(q)$ 满足正交归一化条件

$$\int \phi_i^*(q)\phi_j(q)\mathrm{d}\tau=\delta_{ij} \tag{1.1.2}$$

上式中的积分表示对坐标的积分和对自旋的求和. $\hat{H}$ 的平均值是

$$\begin{aligned}\langle \hat{H}\rangle=&\sum_{i=1}^{N}\int\phi_i^*(q)\hat{H}_0(q)\phi_i(q)\mathrm{d}\tau\\&+\sum_{i,j}^{N}\frac{1}{2}\iint|\phi_i(q_1)|^2\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}|\phi_j(q_2)|^2\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\\&-\sum_{i,j}^{N}\frac{1}{2}\iint\phi_i^*(q_1)\phi_j^*(q_2)\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\phi_j(q_1)\phi_i(q_2)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\end{aligned} \tag{1.1.3}$$

上式右边第三项是粒子全同性和费密统计性质的反映，称作交换能.

在(1.1.2)式条件下求(1.1.3)式的极小，得到决定 ϕ_i 的方程

$$\begin{aligned}&\left[\hat{H}_0(1)+\sum_{j=1}^{N}\int\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}|\phi_j(q_2)|^2\mathrm{d}\tau_2\right]\phi_i(q_1)\\&\qquad-\sum_{j=1}^{N}\left[\int\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\phi_j^*(q_2)\phi_i(q_2)\mathrm{d}\tau_2\right]\phi_j(q_1)\\&\quad=E_i\phi_i(q_1)\end{aligned} \tag{1.1.4}$$

其中第三项可重写为

$$-\left[\sum_{j=1}^{N}\int\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\phi_j^*(q_2)\phi_i(q_2)\mathrm{d}\tau_2\frac{\phi_j(q_1)}{\phi_i(q_1)}\right]\phi_i(q_1) \tag{1.1.5}$$

此式又可写为 $\hat{V}_{\mathrm{ex}}\phi_i(q_1)$ 的形式. (1.1.4)式左边的第二项是库仑势，第三项称为交换势. (1.1.4) 式称为 Hartree-Fock 方程. 若取

$$\phi_i(q)=\psi_i(\boldsymbol{x})\eta_i(\sigma)$$

$\psi_i(\boldsymbol{x})$是空间波函数；$\eta_i(\sigma)$ 是自旋波函数，可取 $\alpha\left(s_z=\frac{\hbar}{2}\right)$和 $\beta\left(s_z=-\frac{\hbar}{2}\right)$中的一个. 进一步设想 $i=1,2,\cdots,p$ 时 $\eta_i(\sigma)$ 取 α, $i=p+1,\cdots,N$ 时 $\eta_i(\sigma)$取 β，则(1. 1. 4)式可写为

$$\begin{aligned}&\left[\hat{H}_0(1)+\int\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\rho(\boldsymbol{x}_2)\mathrm{d}^3x_2\right]\psi_i(\boldsymbol{x}_1)\\&\quad-\sum_{j=1}^{p}\left[\int\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\psi_j^*(\boldsymbol{x}_2)\psi_i(\boldsymbol{x}_2)\mathrm{d}^3x_2\right]\psi_j(\boldsymbol{x}_1)\\&\quad=E_i\psi_i(\boldsymbol{x}_1)\quad i=1,2,\cdots,p.\\&\left[H_0(1)+\int\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\rho(\boldsymbol{x}_2)\mathrm{d}^3x_2\right]\psi_i(\boldsymbol{x}_1)\\&\quad-\sum_{j=p+1}^{N}\left[\int\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\psi_j^*(\boldsymbol{x}_2)\psi_i(\boldsymbol{x}_2)\mathrm{d}^3x_2\right]\psi_j(\boldsymbol{x}_1)\\&\quad=E_i\psi_i(\boldsymbol{x}_1)\quad i=p+1,\cdots,N\end{aligned}\tag{1.1.6}$$

其中

$$\rho(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^{N}|\psi_i(\boldsymbol{x})|^2\tag{1.1.7}$$

$\rho(\boldsymbol{x})$是 $\boldsymbol{x}$ 处的电子几率密度. (1. 1. 6)式表明，交换作用只存在于相同自旋状态之间. 根据Koopman定理，Hartree-Fock方程中 E_i 的物理意义是，在系统中取出状态为 ϕ_i 的电子并保持其它电子的状态不变时，系统能量的变化. 在这个意义上也可以说 E_i 是状态为 ϕ_i 的电子的“能量”. 实际上当一个电子的状态发生变化时，要保持其他电子的状态不变是不可能的，只有在一定近似下才能这样讲，所以对 E_i 赋予状态 ϕ_i 的电子的能量本征值的意义是有条件的.

考虑密度为 n 的自由电子气，假定电子气处于均匀分布的正

电荷基底中，整个系统是电中性的(称为凝胶模型). 单电子波函数可选为

$$\phi_{k\sigma}=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{ik\cdot x}\eta(\sigma) \tag{1.1.8}$$

$\eta(\sigma)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\alpha$ 或 $\eta(\sigma)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\beta$, $\boldsymbol{k}$ 是波矢，每个波矢量有两个自旋状态. (1.1.4)式右边第二项是电子之间的库仑作用，它和电子与正电荷背景之间的相互作用能互相抵消. 现在讨论交换项. 根据(1.1.5)式，对波矢量为 $\boldsymbol{k}$ 的电子有

$$V_{ex,\boldsymbol{k}}=\sum_{\substack{|\boldsymbol{k}'|<|\boldsymbol{k}_F|\\ \text{自旋平行}}}\int\left(-\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\right)e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})}d^3x' \tag{1.1.9}$$

完成对 $\boldsymbol{k}'$ 的求和，记 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}$, 得到

$$V_{ex,\boldsymbol{k}}=-\int d^3R\frac{e^2}{R}\frac{1}{2\pi^2R^3}(\sin k_FR-k_FR\cos k_FR)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}$$

完成角度积分后得到

$$V_{ex,\boldsymbol{k}}=-\int dR4\pi R^2\frac{e^2}{R}\rho_{ex,\boldsymbol{k}}(R)$$

$$\rho_{ex,\boldsymbol{k}}(R)=\frac{1}{2\pi^2}\frac{\sin kR}{kR}[\sin k_FR-k_FR\sin k_FR] \tag{1.1.10}$$

此式表明，交换势就像围绕每个电子周围有一团密度为 $-\rho_{ex,\boldsymbol{k}}(R)$ 的电荷所产生的势. 交换势与 $\boldsymbol{k}$ 有关，即依赖于电子自身的状态. 将(1.1.10)式中的 $\rho_{ex,\boldsymbol{k}}(R)$ 对 $\boldsymbol{k}$ 求平均，得到

$$\bar{\rho}_{ex}(R)=-\frac{9}{2}n\left[\frac{k_FR\cos k_FR-\sin k_FR}{(k_FR)^3}\right]^2 \tag{1.1.11}$$

这样，对 $\boldsymbol{x}$ 处的一个电子，其周围的平均电子密度变为

$$\begin{aligned}\bar{\rho}&=n+\bar{\rho}_{ex}(R)\\&=n\left[1-\frac{9}{2}\left(\frac{k_FR\cos k_FR-\sin k_FR}{(k_FR)^3}\right)^2\right]\end{aligned} \tag{1.1.12}$$

$\bar{\rho}$ 随 R 的变化表示在图 1.1 中. 在 $R=0$ 处，平均电子密度只有远

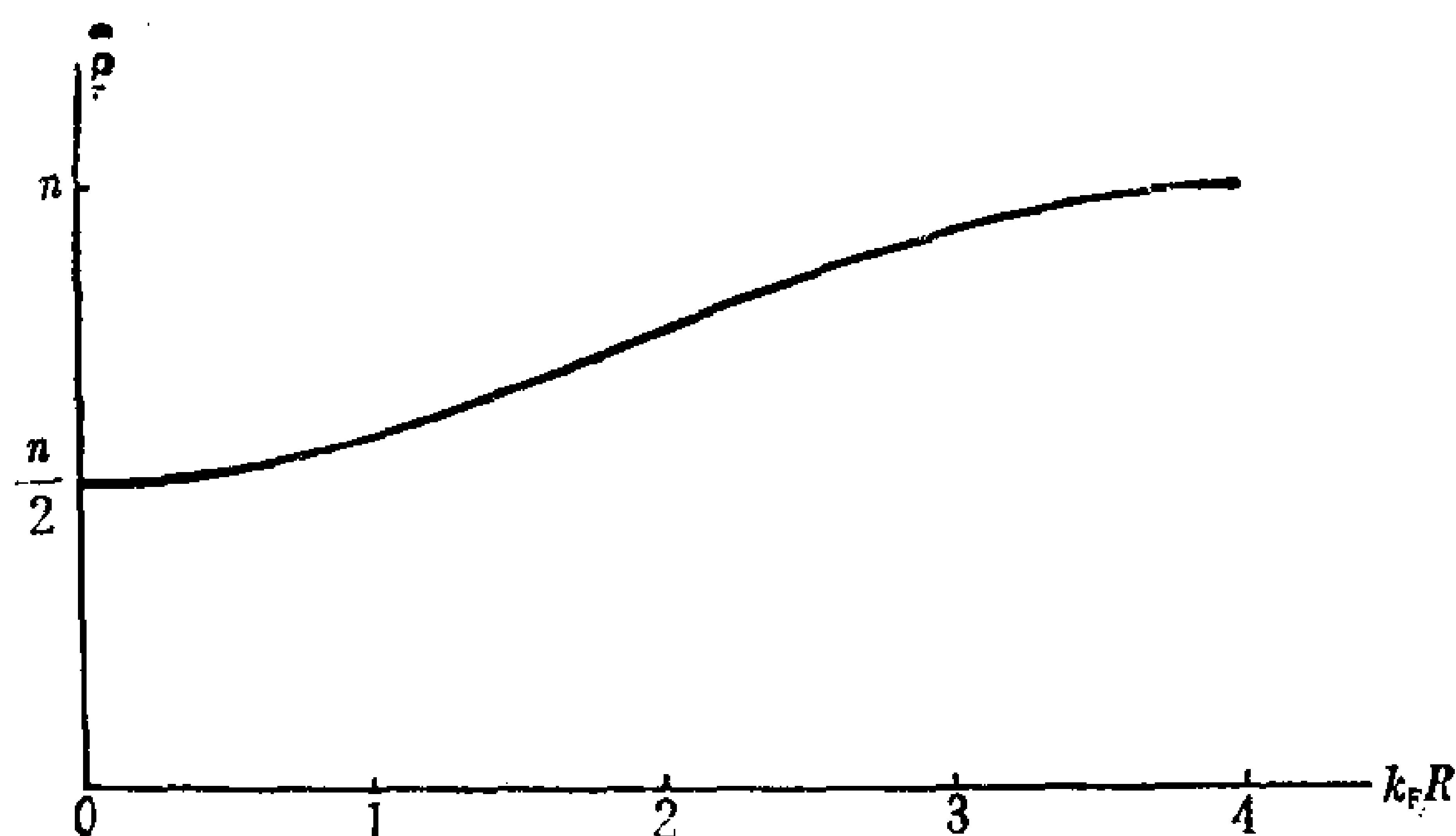


图 1.1

处的一半. 其物理意义是容易理解的: 由于 Pauli 原理, 自旋平行的电子位于空间同一点的几率等于零, 即在很小的距离同时发现这两个电子的几率是很小的. 这好像在每个电子周围出现了"空穴", 称为交换空穴或费密空穴. 对带电粒子, 则形成局部的电荷亏损, 并导致电子静电势的变化. 交换势即表示这种"交换空穴"对单电子态的影响.

由 Hartree-Fock 近似算出的单电子态密度与实验并不符合, Hartree-Fock 波函数并不是多电子系统真实波函数的很好近似. 但后来的研究证明, "交换空穴"事实上是存在的. 为了更好的解决多电子问题, 我们应该进一步考虑电子之间相互关联所引起的物理效应. 仍考虑凝胶模型, 选一个特定的电子, 考虑它对其它电子的影响. 如果略去量子效应, 则在经典的静电势作用下, 其它电子将远离这个电子, 直到出现相等的正电荷(背景电荷)使这个特定电子在远处的电场被抵消. 换句话说, 电子运动的相互关联使这个特定电子的电场被屏蔽. 在电子周围产生电荷密度的空穴. 交换空穴只包含一半电子电荷, 自旋反平行的那一半电子密度不受交换作用的影响, 但受库仑作用的影响. 这样, 交换作用和库仑作用有相同的结果, 即在试验电子周围产生电子密度的空穴.

在大多数固体中库仑效应和交换效应差不多是相同大小的，只包括交换效应并不是很好的近似. 交换和库仑空穴的出现引起屏蔽效应，除非电子之间的距离很小，它们之间的相互作用将大大减小. 电子运动时库仑和交换空穴将随电子一起运动，使电子的运动规律与自由电子很不相同. 研究固体中电子的运动规律时必须考虑电子之间相互作用引起的效应.

二、元激发和准粒子

现在讨论多粒子系统低激发态的性质，固体的很多性质与低激发态有关. 因为粒子之间有相互作用，任何一个粒子的运动都与其它粒子有关，所以不存在严格的单粒子态，量子态或能级是指多粒子系统作为整体的量子力学定态. 由于固体包括非常大量的粒子，要计算系统的准确定态是非常困难的. 但低温下情况比较特殊. 多粒子系统的配分函数 Z 可写为

$$Z=\sum_{n,N}e^{-(E_{nN}-\mu N)/T}$$

其中 n 是量子数，N 是粒子数. 可以看出，$T\to 0$ 时，由于 $e^{-E_{nN}/T}$ 因子的存在，只有距基态比较近的能级(低激发态)才在 Z 的求和中起作用.

多粒子系统低激发态的理论是 Landau 首先提出来的. 他指出，宏观物体的任何一个低激发态在量子力学中都可以看成是一些单个的“元激发”的集合. 这些元激发的行为像一些在物体所占体积中运动、并具有一定能量和动量的粒子一样，因此又称为准粒子. 元激发是由系统内粒子之间的相互作用产生的，属于整个系统而不属于个别粒子. 元激发的数目也完全不必等于系统的粒子数. 准粒子的性质也与理想气体中单粒子的性质不同，它们有不同的色散关系.

以晶格振动系统为例. 在简谐近似下其哈密顿量 $\hat{H}$ 和能量

E 可写为

$$\hat{H}=\sum_{q}\omega_{q}\left[a_{q}^{+}a_{q}+\frac{1}{2}\right]$$
$$E=\sum_{q}\omega_{q}\left[n_{q}\quad+\frac{1}{2}\right] \tag{1.1.13}$$

n_q 是波矢量为 q 的声子的数目．这些声子就是系统的元激发，它们有确定的能量和动量．系统状态的变化可以用这些元激发的产生和消灭描写．每个元激发的能量是 ω_q，动量是 q．这些元激发具有粒子的性质，称为准粒子，a_q^+、a_q 分别是这些元激发的产生和消灭算符．基态是没有元激发的态($n_q=0$) 或称为元激发的真空态．基态能量等于各个振子零点能的和．$n_q\neq 0$ 是晶格振动系统的激发态，可用元激发(声子)的集合描写．

如果考虑非简谐效应，并以一维链为例，则有

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$$

其中 $\hat{H}_0$ 是简谐近似下的哈密顿量；$\hat{H}_1$ 是非简谐部分，可以写为

$$\hat{H}_1=\sum_{k,l,m}\gamma(k,l,m)\delta_{l+k+m,0}(a_{-k}^{\pm}-a_k)(a_{-l}^{\pm}-a_l)(a_{-m}^{\pm}-a_m)$$

其中 $\gamma(k,l,m)$ 是特定过程的矩阵元，$\delta_{l+k+m,0}$ 表示 $\hat{H}_1$ 包含的过程中的动量守恒．$\hat{H}_1$ 包括四种类型的项，其相应的物理过程为

$a_{-k}^{\pm}a_{-l}^{\pm}a_{-m}^{\pm}$，　产生三个声子

$a_k a_l a_m$，　　消灭三个声子

$a_{-k}^{\pm}a_{-l}^{\pm}a_m$，　产生两个声子，消灭一个声子

$a_k a_l a_{-m}^{\pm}$，　产生一个声子，消灭两个声子

因此，非简谐项可以用元激发的相互作用描写．这种相互作用使声子具有一定的寿命，并使声子能量发生变化．

以上对声子系统的分析可以推广到一般的多粒子系统．假定可以进行某种正则变换，将多粒子系统的哈密顿量变换到一组近

似独立的元激发，即将哈密顿量变换成下面的形式：

$$\hat{H}'=E_0+\sum_q \varepsilon'_q A_q^+ A_q+f(\cdots,A_q,\cdots,A_q^+,\cdots) \quad (1.1.14)$$

则 E_0 是相互作用系统基态的能量，ε'_q 是元激发的能量，A_q^+、A_q 分别是元激发的产生和消灭算符. ε'_q 和 q 的关系称为色散关系。

(1.1.14)式中的 f 描写元激发之间的相互作用，它使元激发的能级 ε'_q 变宽. 由测不准原理我们有 $\Delta\varepsilon'_q\Delta t\approx\hbar$，这表明元激发有寿命 $\tau_q\approx\hbar(\Delta\varepsilon'_q)^{-1}$. τ_q 必须相当长，元激发才有确定的意义. 相互作用 f 很小时元激发的寿命比较长. $f=0$ 时我们得到元激发的自由气体，这时元激发的寿命是无穷的.

元激发有两种类型，即个别激发和集体激发. 相互作用电子气中的电子-空穴对激发，超导态中的准粒子激发都是个别激发. 声子、等离激元、磁振子等属于集体激发. He^4 中的旋子是反常情况，兼有二者的性质. 但有些作者将两种元激发都称为准粒子，因为它们都具有粒子的性质. 在一个给定的多粒子系统中可以同时存在一种以上的元激发，如在电子气中可以同时存在个别激发和等离激元.

本书介绍的格林函数方法是研究固体中元激发的有力工具. 用它可以计算元激发的能量和寿命及固体的其他物理性质.

§1.2 相互作用绘景

本节简要介绍量子力学中的三种绘景及其相互变换的理论，作为格林函数理论的预备知识.

一、Schrödinger 绘景

Schrödinger 绘景中态矢量随时间变化而算符不随时间变化. 态矢量 $|\Psi_S(t)\rangle$ 随时间的变化服从 Schrödinger 方程

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_S(t)\rangle = \hat{H}|\Psi_S(t)\rangle \tag{1.2.1}$$

这是一个一阶偏微分方程，t_0 时刻的初态决定系统的演化．对保守系统，$\hat{H}$ 不显含时间，这时(1.2.1)式的形式解可写为

$$|\Psi_S(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)}|\Psi_S(t_0)\rangle \tag{1.2.2}$$

上式的算符指数定义为它的幂级数展开．因为 $\hat{H}$ 是厄米算符，所以指数代表一个么正算符．$|\Psi_S(t_0)\rangle$是 t_0 时刻的态．(1.2.2)式可以看作在$e^{-i\hat{H}(t-t_0)}$的作用下态矢量由$|\Psi_S(t_0)\rangle$变为$|\Psi_S(t)\rangle$，即态矢量在 Hilbert 空间中完成了一个广义旋转．因为

$$\langle\Psi_S(t)|\Psi_S(t)\rangle = \langle\Psi_S(t_0)|\Psi_S(t_0)\rangle$$

所以态矢量的模在旋转中不变化，广义旋转是一个纯粹的转动．

二、相互作用绘景

假定 $\hat{H}$ 不依赖于时间并可写为两项之和

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \tag{1.2.3}$$

一般情况下 $\hat{H}_0$ 的问题是可解的，$\hat{H}_1$ 代表粒子之间的相互作用或外场与系统的相互作用．相互作用绘景中的态矢量定义为

$$|\Psi_I(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t}|\Psi_S(t)\rangle \tag{1.2.4}$$

$|\Psi_I(t)\rangle$的运动方程推导如下：

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)\rangle &= -\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t}|\Psi_S(t)\rangle + e^{i\hat{H}_0 t} i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_S(t)\rangle \\ &= e^{iH_0 t}(-\hat{H}_0 + \hat{H}_0 + \hat{H}_1)e^{-iH_0 t}|\Psi_I(t)\rangle \end{aligned}$$

由此得到

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)\rangle = \hat{H}_1(t)|\Psi_I(t)\rangle$$

$$\hat{H}_1(t) = e^{i\hat{H}_0 t}\hat{H}_1 e^{-i\hat{H}_0 t} \tag{1.2.5}$$

即使 $\hat{H}_1$ 不显含时间(保守系统)，通常 $\hat{H}_1(t)$ 也与时间有关．一般情况下 $\hat{H}_0$ 与 $\hat{H}_1$ 并不对易，因此算符的次序是很重要的．Schrö-

dinger 绘景中任意算符的矩阵元可写为

$$\langle \Psi'_{\mathrm{S}}(t)|\hat{O}_{\mathrm{S}}|\Psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle=\langle \Psi'_{\mathrm{I}}(t)|\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t}O_{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t}|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle \tag{1.2.6}$$

算符 $\hat{O}$ 在两个绘景中的平均值应该相等，即两个绘景在物理上是等价的. 由此得到相互作用绘景中的算符为

$$\hat{O}_{\mathrm{I}}(t)\equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t}\hat{O}_{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t} \tag{1.2.7}$$

(1.2.5)式和(1.2.7)式表明，算符 $\hat{O}_{\mathrm{I}}(t)$ 和态矢量 $|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle$ 都随时间变化. 重要的是，相互作用绘景中算符的运动方程特别简单. 对(1.2.7)式求微商得到

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_{\mathrm{I}}(t)&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t}(\hat{O}_{\mathrm{S}}\hat{H}_0-\hat{H}_0\hat{O}_{\mathrm{S}})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t}\\&=[\hat{O}_{\mathrm{I}}(t),\hat{H}_0]\end{aligned} \tag{1.2.8}$$

对自由费密子系统，$\hat{H}_0$ 是对角的

$$\hat{H}_0=\sum_{k}\varepsilon_k^0C_k^+C_k$$

其中 C_k^+、C_k 是费密子的产生和消灭算符. 由(1.2.8)式可以求出相互作用绘景中 C_k 随时间的变化为

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}C_{k\mathrm{I}}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t}[C_{k\mathrm{S}},\hat{H}_0]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t}=\varepsilon_k^0C_{k\mathrm{I}}(t)$$

积分得到

$$C_{k\mathrm{I}}(t)=C_k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_k^0t} \tag{1.2.9}$$

同理可得(或取上式的共轭算符)

$$C_{k\mathrm{I}}^+(t)=C_k^+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon_k^0t} \tag{1.2.10}$$

下面讨论方程(1.2.5)的解. 定义么正算符 $\hat{U}(t,t_0)$ 为

$$|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle=\hat{U}(t,t_0)|\Psi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle \tag{1.2.11}$$

$\hat{U}(t,t_0)$ 是系统的时间演化算符. 显然 $\hat{U}(t,t_0)$ 必须满足

$$\hat{U}(t_0,t_0)=1 \tag{1.2.12}$$

对保守系统,$\hat{U}(t,t_0)$可用绘景变换的方法求出

$$|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t}|\Psi_s(t)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)}|\Psi_s(t_0)\rangle$$

$$=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t_0}|\Psi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle$$

由此得到

$$\hat{U}(t,t_0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t_0} \qquad (1.2.13)$$

因为 $\hat{H}$ 并不与 $\hat{H}_0$ 对易，上式中算符的次序是很重要的. 由(1.2.13)式可以得到 $\hat{U}$ 算符的几个重要性质

1. $\hat{U}^{+}(t,t_0)U(t,t_0)=\hat{U}(t,t_0)\hat{U}^{+}(t,t_0)=1 \qquad (1.2.14)$

   $\hat{U}^{+}(t,t_0)=\hat{U}^{-1}(t,t_0)$

2. $\hat{U}(t_1,t_2)\hat{U}(t_2,l_3)=\hat{U}(t_1,t_3) \qquad (1.2.15)$

3. $\hat{U}(t,t_0)\hat{U}(t_0,t)=1 \qquad (1.2.16)$

(1.2.13)式是 $\hat{U}$ 的形式解,用它可证明一些重要的公式,但不适用于作实际计算. 为了进行实际计算需先求出 $\hat{U}$ 的积分方程，然后用重复的方法求解. 由(1.2.5)式和(1.2.11) 式可以证明 $\hat{U}$ 满足下面的微分方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)=\hat{H}_1(t)\hat{U}(t,t_0) \qquad (1.2.17)$$

积分可得

$$\hat{U}(t,t_0)-\hat{U}(t_0,t_0)=-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\hat{H}_1(t')\hat{U}(t',t_0)$$

此方程与初值条件(1.2.12)一起可写为

$$\hat{U}(t,t_0)=1-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\hat{H}_1(t')\hat{U}(t',t_0) \qquad (1.2.18)$$

这个方程是微扰论的出发点. 如果 $\hat{U}$ 不是算符而是一般的函数，因为独立变量出现在积分上限，所以(1.2.18)式是一个 Volterra 积分方程. 在一般条件下 Volterra 方程可用重复的方法求解，得到的解是收敛的. 尚未证明算符方程也有这样的性质，但一般仍

用重复的方法求解(1.2.18)式. 求解时要注意算符的正确次序. 令 $t=t'$,并将积分变量 t' 改为 t'',可将(1.2.18)式改写为

$$\hat{U}(t',t_0)=1-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t'}\mathrm{d}t''\hat{H}_1(t'')\hat{U}(t'',t_0)$$

将此式代入(1.2.18)式中的被积函数,得到

$$\hat{U}(t,t_0)=1-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\hat{H}_1(t')+(-\mathrm{i})^2\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t'}\mathrm{d}t''\hat{H}_1(t')\times\hat{H}_1(t'')\hat{U}(t'',t_0)$$

无限地迭代下去就得到

$$\begin{aligned}\hat{U}(t,t_0)&=1+(-\mathrm{i})\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\hat{H}_1(t')\\&\quad+(-\mathrm{i})^2\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t'}\mathrm{d}t''\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')+\cdots\\&=1+\sum_{n=1}^{\infty}(-\mathrm{i})^n\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\\&\quad\int_{t_0}^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\hat{H}(t_1)\hat{H}_1(t_2)\cdots\hat{H}_1(t_n)\end{aligned}\qquad(1.2.19)$$

从积分上限可以看出

$$t>t_1>t_2>\cdots>t_{n-1}$$

这样就得到了 $\hat{U}(t,t_0)$ 的幂级数解. 下面引入 Dyson 编时算符. 这种算符使我们能将(1.2.19)式写成极其紧凑的形式, (1.2.19)式第三项中的积分可以写为

$$\begin{aligned}&\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t'}\mathrm{d}t''\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')\\&=\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t'}\mathrm{d}t''\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')+\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t''\\&\quad\times\int_{t''}^{t}dt'\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')\end{aligned}\qquad(1.2.20)$$

右边第二项是将第一项中的积分次序变换得到的,如图 1.2 所示. 在第二项中交换积分变量 t'、t'' 得到

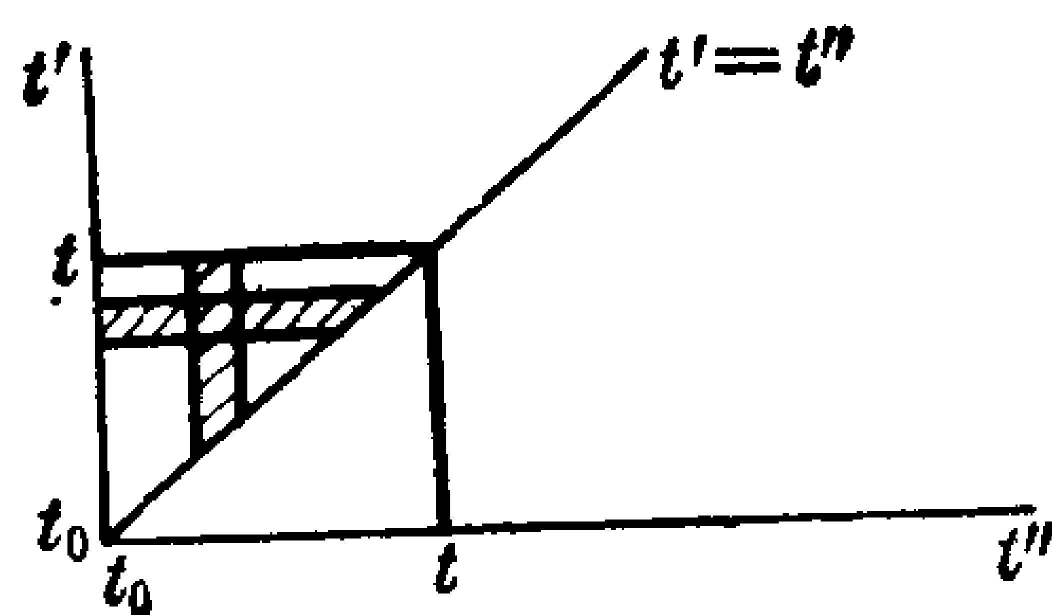


图 1.2

$$\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'' \int_{t''}^{t} \mathrm{d}t' \hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')$$
$$=\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' \int_{t'}^{t} \mathrm{d}t'' \hat{H}_1(t'')\hat{H}_1(t')$$

则(1.2.20)式可重写为

$$\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' \int_{t_0}^{t'} \mathrm{d}t'' \hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')$$
$$=\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'' [\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')\theta(t'-t'')$$
$$+\hat{H}_1(t'')\hat{H}_1(t')\theta(t''-t')] \tag{1.2.21}$$

如果定义算符的编时乘积 T 为将时间最早的算符 排 在 右边，则(1.2.21)式可写为

$$\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' \int_{t}^{t'} \mathrm{d}t'' \hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')=\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'' \mathrm{T}[\hat{H}_1(t')\hat{H}_1(t'')] \tag{1.2.22}$$

上式左边的积分变量必须满足 $t'>t''$. 右边的积分变量已不受此限制，t''可以大于 t' 也可以小于t'，因而积分区域比等式左边的大一倍，同时前面出现因子$\frac{1}{2}$. 将此结果推广可以得到

$$\hat{U}(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1\cdots\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_n T[\hat{H}_1(t_1),\cdots,\hat{H}_1(t_n)] \tag{1.2.23}$$

$n=0$ 的项是单位算符. (1.2.23) 式可用数学归纳法证明. 此式也可写为

$$\hat{U}(t,t_0)=\mathrm{T}\exp\left[-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\hat{H}_1(t')\right] \qquad (1.2.24)$$

三、Heisenberg 绘景

Heisenberg 绘景中态矢量 $|\Psi_{\mathrm{H}}(t)\rangle$ 不随时间变化而力学量(算符)随时间变化. $|\Psi_{\mathrm{H}}(t)\rangle$定义为

$$|\Psi_{\mathrm{H}}(t)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}|\Psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle \qquad (1.2.25)$$

由 Schrödinger 方程(1.2.1)可以证明

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_{\mathrm{H}}(t)\rangle=0 \qquad (1.2.26)$$

即$|\Psi_{\mathrm{H}}\rangle$ 不随时间变化. Schrödinger绘景中任意算符的矩阵元可以写为

$$\langle\Psi'_{\mathrm{S}}(t)|\hat{O}_{\mathrm{S}}|\Psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle=\langle\Psi'_{\mathrm{H}}|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{O}_{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}|\Psi_{\mathrm{H}}\rangle \qquad (1.2.27)$$

由此得到 Heisenberg 绘景中的算符为

$$\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}O_{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \qquad (1.2.28)$$

如果取平面波为二次量子化表象的基,则 Schrödinger 绘景中的场算符$\Psi_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{x})$可展开为

$$\Psi_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}C_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

根据(1.2.28)式在 Heisenberg 绘景中

$$\Psi_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\,C_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}C_{\mathrm{H}\boldsymbol{k}}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

$C_{\mathrm{H}\boldsymbol{k}}(t)$是 Heisenberg 绘景中费密子的消灭算符. 由 (1.2.28)式

可以求出

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}[\hat{O}_{\mathrm{S}},H]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}=[\hat{O}_{\mathrm{H}}(t),\hat{H}] \tag{1.2.29}$$

这是 $\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)$的运动方程. 如果 $\hat{O}_{\mathrm{S}}$ 和 $\hat{H}$ 对易,则上式右等于零,$\hat{O}_{\mathrm{H}}$ 是运动常数.

由(1.2.28)式可求出 $\hat{O}_{\mathrm{H}}$ 和 $\hat{O}_{\mathrm{I}}$ 的关系为

$$\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t}O_{\mathrm{I}}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \tag{1.2.30}$$

利用 $\hat{U}$ 算符的形式解(1.2.13)式可将此式写为

$$\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)=\hat{U}(0,t)\hat{O}_{\mathrm{I}}(t)\hat{U}(t,0) \tag{1.2.31}$$

由以上有关定义还可得到

$$\begin{aligned}|\Psi_{\mathrm{H}}\rangle&=|\Psi_{\mathrm{S}}(0)\rangle=|\Psi_{\mathrm{I}}(0)\rangle\\ \hat{O}_{\mathrm{S}}&=\hat{O}_{\mathrm{H}}(0)=O_{\mathrm{I}}(0)\end{aligned} \tag{1.2.32}$$

因此三个绘景在 $t=0$ 时重合. Schrödinger 方程的定态解在 Heisenberg 绘景中的相应态矢量满足下面的 Schrödinger 方程

$$\hat{H}|\Psi_{\mathrm{H}}\rangle=E|\Psi_{\mathrm{H}}\rangle \tag{1.2.33}$$

这个态矢量是系统的准确本征态, 对有相互作用的多粒子系统是很复杂的. 由(1.2.32)式和 $\hat{U}$ 算符的定义可以得到

$$|\Psi_{\mathrm{H}}\rangle=|\Psi_{\mathrm{I}}(0)\rangle=\hat{U}(0,t_0)|\Psi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle \tag{1.2.34}$$

它使我们可由 t_0 时相互作用绘景中的态矢量得到准确本征态 $|\Psi_{\mathrm{H}}\rangle$.

四、绝热引入相互作用

绝热引入相互作用是一种数学方法, 用它可以由无相互作用系统的本征态得到相互作用多粒子系统的准确本征态. 假定 $\hat{H}$ 可以分为两部分: $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$, $\hat{H}_0$ 是粒子之间没有相互作用时系统的哈密顿量, $\hat{H}_1$ 代表粒子之间的相互作用. 将 $\hat{H}$ 写为以下形式

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\mathrm{e}^{-\epsilon|t|}\hat{H}_1 \tag{1.2.35}$$

ε 是一个小的正数. $t\to\pm\infty$时, $e^{-\varepsilon|t|}\to 0$, $\hat{H}\to\hat{H}_0$. $t\to 0$ 时$e^{-\varepsilon|t|}$很慢地增加到 1, 我们得到有相互作用时系统 的哈密顿量. 在计算的最后取 $\varepsilon\to 0$. (1.2.35)式表明,微扰的引入是 无穷慢的或绝热的. 最后结果应该与 ε 无关.

哈密顿量(1.2.35)式依赖于时间. 我们在相互作用绘景中对其求解. 这时

$$|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle=\hat{U}_{\varepsilon}(t,t_0)|\Psi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle \tag{1.2.36}$$

其中

$$U_{\varepsilon}(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\cdots\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_n\mathrm{e}^{-\varepsilon(|t_1|+\cdots+|t_n|)}\times T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)] \tag{1.2.37}$$

现在令 $t_0\to-\infty$, 由(1.2.35) 式这时 $\hat{H}\to\hat{H}_0$. 在 Schrödinger 绘景中有

$$|\Psi_{\mathrm{S}}(t_0)\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0t_0}|\Phi_0\rangle \tag{1.2.38}$$

$|\Phi_0\rangle$是 $\hat{H}_0$ 的本征态,是不依赖于时间的定态

$$\hat{H}_0|\Phi_0\rangle=E_0|\Phi_0\rangle \tag{1.2.39}$$

相互作用绘景中的态矢量变为

$$|\Psi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t_0}|\Psi_{\mathrm{S}}(t_0)\rangle=|\Phi_0\rangle \tag{1.2.40}$$

这样,当 $t_0\to-\infty$时 $|\Psi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle$不依赖于时间. 这从

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle=\mathrm{e}^{-\varepsilon|t|}H_1(t)|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle\to 0,\ t\to\pm\infty \tag{1.2.41}$$

也可看出. 若无微扰, 则相互作用绘景中的本征态与时间无关, 是未微扰 Schrödinger 方程的定态解. 当 t 从$-\infty$增加时, 相互作用逐渐引入,态随时间的演化由(1.2.36) 决定. $t=0$ 时相互作用达到实际的强度. 这样,我们得到下面的基本关系式

$$|\Psi_{\mathrm{H}}\rangle=|\Psi_{\mathrm{I}}(0)\rangle=U_{\varepsilon}(0,-\infty)|\Phi_0\rangle \tag{1.2.42}$$

用此公式可由 $\hat{H}_0$ 的本征态得到相互作用系统的准确本征态.

M. Gell-Mann 和 F. Low 曾证明，在从 $t\to-\infty$ 无穷慢引入相互作用以后,从 $|\Phi_0\rangle$ 得到的态是 $\hat{H}$ 的本征态但不一定是系统的基态. 只有当引入相互作用以后除了基态能量的移动外不发生能谱结构的重新调整,如出现更低能量的态，发生凝聚等,绝热假设才是正确的. 因此由绝热假设推出的结果不能直接应用于超导、超流等现象.

五、编时乘积

我们将(1.2.22)式中引入的编时算符略为推广. 对玻色算符仍保留原来的定义. 费密算符乘积 $\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\cdots T$ 的编时乘积的定义是:按时间递减顺序从左向右排列算符，再乘以 $(-1)^p$. p 是从 $\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\cdots$ 变换到编时乘积所要求的顺序时费密算符所作的置换数. 若 $\hat{F}_1(t_1)$、$\hat{F}_2(t_2)$ 是费密算符,$\hat{B}_1(t_3)$、$\hat{B}_2(t_4)$ 是玻色算符,则有

$$T[\hat{F}_1(t_1)\hat{F}_2(t_2)]=\begin{cases}\hat{F}_1(t_1)\hat{F}_2(t_2), & t_1>t_2\\ -\hat{F}_2(t_2)\hat{F}_1(t_1), & t_1<t_2\end{cases}\tag{1.2.43}$$

$$T[\hat{B}_1(t_3)\hat{B}_2(t_4)]=\begin{cases}\hat{B}_1(t_3)\hat{B}_2(t_4), & t_3>t_4\\ \hat{B}_2(t_4)\hat{B}_1(t_3), & t_3<t_4\end{cases}\tag{1.2.44}$$

$$T[\hat{B}_1(t_3)\hat{F}_1(t_1)]=\begin{cases}\hat{B}_1(t_3)\hat{F}_1(t_1), & t_3>t_1\\ \hat{F}_1(t_1)\hat{B}_1(t_3), & t_3<t_1\end{cases}\tag{1.2.45}$$

对算符 $\hat{H}_1$,新的 T 乘积定义与(1.2.22)式中的定义是一致的. 因为 $\hat{H}_1$ 中费密算符总是成对出现. 编时运算规则对Heisenberg 绘景和相互作用绘景中的算符是相同的.

以后我们经常遇到几个 Heisenberg 算符编时乘积对系统基态 $|\Psi_{\rm H}^0\rangle$ 的平均值

$$\langle\Psi_{\rm H}^0|T[\hat{A}_{\rm H}(t)\hat{B}_{\rm H}(t')\hat{c}_{\rm H}(t'')\cdots]|\Psi_{\rm H}^0\rangle\tag{1.2.46}$$

下面以两个算符为例，说明如何将其变换到相互作用绘景．假定时间顺序为 $t>t'$，变换到相互作用绘景后有

$$\begin{aligned}&\langle\Phi_0|\hat{U}^{-1}(0,-\infty)[\hat{U}(0t)\hat{A}_{\rm I}(t)\hat{U}(t,0)][\hat{U}(0,t')\hat{B}_{\rm I}(t')\\&\times\hat{U}(t',0)]\hat{U}(0,-\infty)|\Phi_0\rangle\\=&\langle\Phi_0|\hat{U}^{-1}(\infty,-\infty)\hat{U}(\infty,t)\hat{A}_{\rm I}(t)\hat{U}(t,t')\hat{B}_{\rm I}(t')\\&\times\hat{U}(t',-\infty)|\Phi_0\rangle=\langle\Phi_0|\hat{U}^{-1}(\infty,-\infty)T[\hat{A}_{\rm I}(t)\hat{B}_{\rm I}(t')\\&\times U(\infty,-\infty)]|\Phi_0\rangle\end{aligned}\tag{1.2.47}$$

其中

$$\langle\Phi_0|\hat{U}^{-1}(\infty,-\infty)=[\hat{U}(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle]^*$$

$|\Phi_0\rangle$是自由粒子系统的基态．根据(1.2.35)式，$\hat{U}(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle$也是自由粒子系统的本征态．系统的基态即能量最低的态必然是非简并的．根据量子力学，处于非简并定态的系统不能在无限慢的扰动下跃迁到另一个态．因此 $\hat{U}(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle$ 也是自由粒子系统的基态，与$|\Phi_0\rangle$只能差一个相因子，即有

$$U(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle=e^{iL}|\Phi_0\rangle$$

文献中称 $U(\infty,-\infty)$ 为 S 矩阵，记为 $S(\infty,-\infty)$，由此得到

$$\begin{aligned}&\langle\Psi_{\rm H}^0|T[\hat{A}_{\rm H}(t)\hat{B}(t')]|\Psi_{\rm H}^0\rangle\\=&\frac{\langle\Phi_0|T[A_{\rm I}(t)B_{\rm I}(t')S(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|S(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle}\end{aligned}\tag{1.2.48}$$

S 矩阵也可写为

$$S(\infty,-\infty)=T\exp[-i\int_{-\infty}^{\infty}dt\,\hat{H}_1(t)]\tag{1.2.49}$$

以上推导可以推广到两个以上算符的情况．但这些结论只适用于对系统的基态求平均．因为系统的任何其它激发态的能级都是多重简并的，可能由粒子间的碰撞而跃迁到其它状态．对激发态求平均时成立的是(1.2.47)而不是(1.2.48)式．

§1.3 单粒子格林函数

用格林函数可以计算多粒子系统的基态能量、元激发的性质、平衡态的热力学性质和系统对外界的响应等. 本节介绍绝对零度格林函数的基本性质. $T>0$ 时的格林函数将在第二章介绍.

一、定义

单粒子格林函数的定义是

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x')=\langle\Psi_0|T[\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\beta}(x')]|\Psi_0\rangle \tag{1.3.1}$$

$|\Psi_0\rangle$是 Heisenberg绘景中相互作用多粒子系统的基态$|\Psi^0_{\mathrm{H}}\rangle$,现在略去了角标 H, $x=(\boldsymbol{x}t)$. 假定系统有N个粒子. $|\Psi_0\rangle$满足方程

$$\hat{H}|\Psi_0\rangle=E|\Psi_0\rangle \tag{1.3.2}$$

我们已假定$|\Psi_0\rangle$是归一化的, $\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle=1$. $\hat{\psi}^{+\alpha}_{\mathrm{H}}(x)$、$\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)$ 是 Heisenberg 绘景中的场算符,其与时间的关系为

$$\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \tag{1.3.3}$$

$\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})$是 Schrödinger 绘景中的场算符, α、β 表示自旋. 根据T乘积的定义有

$$T[\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\beta}(x')]=\begin{cases}\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\psi^+_{\mathrm{H}\beta}(x'), & t>t'\\ \pm\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\beta}(x')\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x), & t'>t\end{cases}$$

等式右边上面的"+"对应于玻色子,下面的"−"对应于费密子. (1.3.1)式可写为

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x')=\begin{cases}\langle\Psi_0|\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\beta}(x')|\Psi_0\rangle, & t>t'\\ \pm\langle\Psi_0|\Psi^+_{\mathrm{H}\beta}(x')\Psi_{\mathrm{H}\alpha}(x)|\Psi_0\rangle, & t<t'\end{cases} \tag{1.3.4}$$

对 $t>t'$, $G_{\alpha\beta}(x,x')$是下面两个态的内积乘以$(-i)$.

$$\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\beta}(x')|\Psi_0\rangle,\quad \hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\alpha}(x)|\Psi_0\rangle$$

这说明 $G_{\alpha\beta}(x,x')$ 是在 x'处给基态 $|\Psi_0\rangle$加一个粒子后在 x 处发现这个粒子的几率振幅，即描写外加粒子的传播．因而 G 又称为传播函数．G 函数的优点是孤立出外加粒子的信息而不涉及基态的无用细节．

对 $t<t'$, $G_{\alpha\beta}(x,x')$是$(-i)$与下面两个态的内积的乘积

$$\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)|\Psi_0\rangle,\quad \hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}(x')|\Psi_0\rangle$$

这些态包含 $N-1$ 个粒子，这时 G 描写一个空穴从$(\boldsymbol{x}t)$到$(\boldsymbol{x}'t')$的传播．

若相互作用与自旋无关，则 $G_{\alpha\beta}(x,x')=G(x,x')\delta_{\alpha\beta}$. 记 $G(x,0)=G(x)$．$G(x)$在 $t=0$ 点不连续，对费密子有

$$G(\boldsymbol{x},0^+)-G(\boldsymbol{x},0^-)=-\mathrm{i}\langle\Psi_0|[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}),\hat{\psi}_\alpha^+(0)]|\Psi_0\rangle=-\mathrm{i}\delta(\boldsymbol{x}) \tag{1.3.5}$$

格林函数空间变量的傅氏变换定义为

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}t,\boldsymbol{x}'t')=\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t,\boldsymbol{k}'t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}')}$$

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t,\boldsymbol{k}'t')=\frac{1}{V}\int\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}t,\boldsymbol{x}'t')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}')} \tag{1.3.6}$$

推导上面第二式时用了关系式

$$\sum_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}=V\delta(\boldsymbol{x})$$

$$\int\mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}=V\delta_{\boldsymbol{k},0}$$

$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t,\boldsymbol{k}'t')$可以表示为

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t,\boldsymbol{k}'t')=-\mathrm{i}\langle\Psi_0|T[C_{\mathrm{H}\boldsymbol{k}\alpha}(t)C_{\mathrm{H}\boldsymbol{k}'\beta}^+(t')]|\Psi_0\rangle \tag{1.3.7}$$

对均匀系统只有 $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}$ 时 $G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t,\boldsymbol{k}'t')$才不等于零．这时

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t)=G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t;\boldsymbol{k}0)=-\mathrm{i}\langle\Psi_0|T[C_{\mathrm{H}\boldsymbol{k}\alpha}(t)C_{\mathrm{H}\boldsymbol{k}\beta}^+(0)]|\Psi_0\rangle \tag{1.3.8}$$

$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t)$正是$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}t)$的傅氏变换

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t)=\int \mathrm{d}^3x G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}t)=\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t)$$

$t>0$时$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t)$描写动量为$\boldsymbol{k}$的粒子的传播，$t<0$时$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t)$描写动量为$\boldsymbol{k}$的空穴的传播.

现在对时间变量进行傅氏变换，定义$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega,\boldsymbol{k}'\omega')$为

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega,\boldsymbol{k}'\omega')=\frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}t\mathrm{d}t' G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t,\boldsymbol{k}'t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t-\omega' t')}$$

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t,\boldsymbol{k}'t')=\frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega,\boldsymbol{k}'\omega')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-\omega' t')} \quad (1.3.9)$$

如果$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t,\boldsymbol{k}'t')$只依赖于时间差$(t-t')$，则对均匀系统上式简化为

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega,\boldsymbol{k}'\omega')=G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)\delta(\omega-\omega')\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}$$

$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)$满足下面的变换方程

$$\begin{aligned}G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t)&=\frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}\omega G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\\ G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)&=\int \mathrm{d}t G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\end{aligned} \quad (1.3.10)$$

后面将会看到，函数$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)$包含更多的信息，用$G(\boldsymbol{k}\omega)$可以求出准粒子的能量和衰减.

二、物理量的表示

利用单粒子格林函数可以计算任何单粒子算符对基态的平均值、基态能量和系统的激发谱. 而G又可用微扰论进行计算，这使格林函数在多粒子系统的研究中起很重要的作用.

考虑单粒子算符

$$\hat{J}=\int \mathrm{d}^3x\hat{J}(\boldsymbol{x}) \tag{1.3.11}$$

$\hat{J}(\boldsymbol{x})$是算符密度，其形式为

$$\hat{J}(\boldsymbol{x})=\sum_{\alpha\beta}\hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x})J_{\beta\alpha}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}) \tag{1.3.12}$$

对基态的平均值

$$\begin{aligned}\langle\hat{J}(\boldsymbol{x})\rangle&=\langle\Psi_0|\hat{J}(\boldsymbol{x})|\Psi_0\rangle\\&=\lim_{\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}}\sum_{\alpha\beta}\hat{J}_{\beta\alpha}(\boldsymbol{x})\langle\Psi_0|\hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})|\Psi_0\rangle\end{aligned} \tag{1.3.13}$$

可用格林函数写为

$$\begin{aligned}\langle\hat{J}(\boldsymbol{x})\rangle&=\pm\mathrm{i}\lim_{t'\to t^+}\lim_{\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}}\sum_{\alpha\beta}\hat{J}_{\beta\alpha}(\boldsymbol{x})G_{\alpha\beta}(x,x')\\&=\pm\mathrm{i}\lim_{t'\to t^+}\lim_{\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}}\mathrm{Tr}[\hat{J}(\boldsymbol{x})G(x,x')]\end{aligned} \tag{1.3.14}$$

在取极限以前先完成$\hat{J}(\boldsymbol{x})$中的运算，因为$\hat{J}(\boldsymbol{x})$可能包含对空间坐标的微商．$t^+=t+0^+$，0^+为一无限小的正数，它使(1.3.14)式中的算符有正确的次序．求迹Tr是对自旋坐标进行的．例如粒子数密度$\langle\hat{n}(\boldsymbol{x})\rangle$和总动能$\langle\hat{T}\rangle$可表示为

$$\langle\hat{n}(\boldsymbol{x})\rangle=\pm\mathrm{i}\mathrm{Tr}G(\boldsymbol{x}t,\boldsymbol{x}t^+) \tag{1.3.15}$$

$$\langle\hat{T}(\boldsymbol{x})\rangle=\pm\mathrm{i}\int\mathrm{d}^3x\lim_{\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}}\left[-\frac{\nabla_x^2}{2m}\mathrm{Tr}G(\boldsymbol{x}t,\boldsymbol{x}'t^+)\right] \tag{1.3.16}$$

下面讨论势能$\langle V\rangle$的表示，

$$\langle\hat{V}\rangle=\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\langle\Psi_0|\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x})\psi_\beta^+(\boldsymbol{x}')V_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}')\Psi_{\beta'}(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_{\alpha'}(\boldsymbol{x})|\Psi_0\rangle \tag{1.3.17}$$

其中重复的自旋坐标表示求和．(1.3.17)式中包含4个场算符，因此需要引入双粒子格林函数．但Schrödinger方程包含势能，

因而可将$\langle\hat{V}\rangle$用单粒子格林函数表示. 哈密顿量 $\hat{H}$ 如下式所示

$$\hat{H}=\int \mathrm{d}^3 x \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}) T(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})$$

$$+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 x \mathrm{d}^3 x' \hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}') V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')_{\alpha\alpha',\beta\beta'} \hat{\psi}_{\beta'}(\boldsymbol{x}') \hat{\psi}_{\alpha'}(\boldsymbol{x})$$

$$(1.3.18)$$

对全同粒子系统,相互作用对粒子交换是不变的,这要求

$$V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')_{\alpha\alpha',\beta\beta'}=V(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x})_{\beta\beta',\alpha\alpha'} \qquad (1.3.19)$$

Heisenberg 算符 $\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)$的运动方程是

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H} t}[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}), \hat{H}] \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H} t} \qquad (1.3.20)$$

其中

$$[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}), \hat{H}]=\int \mathrm{d}^3 z[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{z}) T(\boldsymbol{z}) \hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{z})]$$

$$+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 z \mathrm{d}^3 z'[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{z}) \hat{\psi}_\gamma^+(\boldsymbol{z}')$$

$$V(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{z}')_{\beta\beta',\gamma\gamma'} \hat{\psi}_{\gamma'}(\boldsymbol{z}') \hat{\psi}_{\beta'}(\boldsymbol{z})] \qquad (1.3.21)$$

利用对易关系可将上式表示为对易括弧或反对易括弧. 为确定起见下面讨论费密子的情况,利用反对易关系很容易求出下式

$$[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}), \hat{H}]=T(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 z \hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{z}) V(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x})_{\beta\beta',\alpha\gamma'}$$

$$\hat{\psi}_{\gamma'}(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}_{\beta'}(\boldsymbol{z})$$

$$+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 z' \hat{\psi}_\gamma^+(\boldsymbol{z}') V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}')_{\alpha\beta',\gamma\gamma'} \hat{\psi}_{\gamma'}(\boldsymbol{z}') \hat{\psi}_{\beta'}(\boldsymbol{x}) \qquad (1.3.22)$$

在等式右边第二项中作变量变换 $\beta\to\gamma$、$\beta'\to\gamma'$、$\gamma'\to\beta'$、$z\to z'$, 利用(1.3.19)式和场算符 $\hat{\psi}$ 的反对易性,得到

$$[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}), \hat{H}]=T(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})+\int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{z}' \Psi_\gamma^+(\boldsymbol{z}') V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}')_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}$$

$$\times \hat{\psi}_{\gamma'}(\boldsymbol{z}') \hat{\psi}_{\beta'}(\boldsymbol{x}) \qquad (1.3.23)$$

运动方程(1.3.20)变为

$$\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-T(\boldsymbol{x})\right]\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)$$

$$=\int \mathrm{d}^3z'\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\gamma}(\boldsymbol{z}'t)V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z}')_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}\hat{\psi}_{\mathrm{H}\gamma'}(\boldsymbol{z}'t)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta'}(\boldsymbol{x}t)$$

(1.3.24)

(1.3.23)式、(1.3.24) 式对玻色子系统也是正确的. (1.3.24)式从左边乘以 $\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\alpha}(x')$ 然后求基态平均值,得到

$$\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-T(\boldsymbol{x})\right]\langle\Psi_0|\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\alpha}(x')\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)|\Psi_0\rangle$$

$$=\int \mathrm{d}^3z'\langle\Psi_0|\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\alpha}(\boldsymbol{x}'t')\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\gamma}(\boldsymbol{z}'t)V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z}')_{\alpha\beta',\gamma\gamma'}\hat{\psi}_{\mathrm{H}\gamma'}(\boldsymbol{z}'t)$$

$$\Psi_{\mathrm{H}\beta'}(\boldsymbol{x}t)|\Psi_0\rangle \qquad (1.3.25)$$

取极限 $\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}, t'\to t^{+}$, 上式左边等于

$$\pm\mathrm{i}\lim_{t'\to t^{+}}\lim_{\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}}\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-T(\boldsymbol{x})\right]G_{\alpha\alpha}(x,x') \qquad (1.3.26)$$

对 α 求和,对 $\boldsymbol{x}$ 积分得到

$$\langle\hat{V}\rangle=\pm\frac{1}{2}\mathrm{i}\int\mathrm{d}^3x\lim_{t'\to t^{+}}\lim_{\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}}\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-T(\boldsymbol{x})\right]G_{\alpha\alpha}(x,x')$$

(1.3.27)

与动能的表达式联合,得到基态能量的公式为

$$E=\langle\hat{T}+\hat{V}\rangle=\langle\hat{H}\rangle$$

$$=\pm\frac{1}{2}\mathrm{i}\int\mathrm{d}^3x\lim_{t'\to t^{+}}\lim_{\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}}\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+T(\boldsymbol{x})\right]\mathrm{Tr}G(x,x')$$

$$=+\frac{1}{2}\mathrm{i}\int\mathrm{d}^3x\lim_{t'\to t^{+}}\lim_{\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}}\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\nabla_x^2}{2m}\right]\mathrm{Tr}G(x,x') \quad (1.3.28)$$

对空间均匀系统,G 只依赖于坐标差(证明见后面的(1.3.51))式,以上公式有简单的形式. 对 G 进行下面的傅氏变换

$$G_{\alpha\beta}(x,x')=\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')-\omega(t-t')]}G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega) \quad (1.3.29)$$

$V\to\infty$ 时求和变为积分

$$G_{\alpha\beta}(x,x')=\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3k\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i[\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')-\omega(t-t')]}G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega) \tag{1.3.30}$$

我们得到

$$N=\int d^3x\langle\hat{n}(\boldsymbol{x})\rangle$$

$$=\pm i\frac{V}{(2\pi)^4}\lim_{\eta\to 0^+}\int d^3k\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega\eta}\,\mathrm{Tr}G(\boldsymbol{k}\omega) \tag{1.3.31}$$

$$E=\pm\frac{1}{2}\,i\frac{V}{(2\pi)^4}\lim_{\eta\to 0^+}\int d^3k\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega\eta}\left(\frac{k^2}{2m}+\omega\right)\mathrm{Tr}G(\boldsymbol{k}\omega) \tag{1.3.32}$$

其中收敛因子

$$\lim_{t'\to t^+}e^{i\omega(t'-t)}\equiv\lim_{\eta\to 0^+}e^{i\omega\eta}$$

决定复 ω 平面中的积分回路.

有时基态能量中出现因子$(\omega-k^2/2m)$更为方便. 用Pauli 提出的下述方法可以推出这样的结果. 假定微扰的强度是可变的, 用可变耦合常数 λ 表示. 哈密顿量可写为

$$\hat{H}(\lambda)=\hat{H}_0+\lambda\hat{H}_1 \tag{1.3.33}$$

$$\hat{H}(1)=\hat{H},\qquad \hat{H}(0)=\hat{H}_0$$

对 λ 的任意值, $E(\lambda)$和 $|\Psi_0(\lambda)\rangle$由下面的定态 Schrödinger 方程决定,

$$\hat{H}(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle=E(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle \tag{1.3.34}$$

假定$|\Psi_0(\lambda)\rangle$ 是归一化的, $\langle\Psi_0(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle=1$. 由(1.3.34)式可以得到

$$E(\lambda)=\langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle$$

对参量 λ 求微商可得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}E(\lambda)=\left\langle\frac{\mathrm{d}\Psi_0(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}\middle|\hat{H}(\lambda)\middle|\Psi_0(\lambda)\right\rangle$$

$$+\left\langle\Psi_0(\lambda)\middle|\hat{H}(\lambda)\middle|\frac{\mathrm{d}\Psi_0(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}\right\rangle$$

$$+\left\langle\Psi_0(\lambda)\middle|\frac{\mathrm{d}\hat{H}(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}\middle|\Psi_0(\lambda)\right\rangle$$

$$=E(\lambda)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\langle\Psi_0(\lambda)|\Psi_0(\lambda)\rangle$$

$$+\langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}_1|\Psi_0(\lambda)\rangle$$

$$=\langle\Psi_0(\lambda)|\hat{H}_1|\Psi_0(\lambda)\rangle \tag{1.3.35}$$

上式推导中利用了归一化条件。(1.3.35)式称为 Feynman 定理. 对 λ 从 0 到 1 积分，并注意到 $E(0)=E_0$, $E(1)=E$, 可得到

$$E-E_0=\int_0^1\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\langle\Psi_0(\lambda)|\lambda\hat{H}_0|\Psi_0(\lambda)\rangle \tag{1.3.36}$$

这个关系是Pauli 首先得到的，基态能量的移动只用相互作用 $\lambda\hat{H}_1$ 的矩阵元表示. 一般情况下 $\hat{H}_1$ 表示势能，由以上的讨论可以得到

$$E-E_0=\pm\frac{1}{2}\mathrm{i}\int_0^1\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\int\mathrm{d}^3x\lim_{t'\to t'}\lim_{x'\to x}\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-T(x)\right]\mathrm{Tr}G^\lambda(x,x') \tag{1.3.37}$$

对均匀系统，相应的表达式变为

$$E-E_0=\pm\frac{1}{2}\mathrm{i}\frac{V}{(2\pi)^4}\cdot\int\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\int\mathrm{d}^3k\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}\left(\omega-\frac{k^2}{2m}\right)\mathrm{Tr}G^\lambda(\boldsymbol{k},\omega) \tag{1.3.38}$$

三、自由费密子格林函数

无相互作用多粒子系统的 $G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)$ 很容易求出来. 自由费

密子系统的基态是：$|\boldsymbol{k}|\leqslant k_{\mathrm{F}}$ 的态被占满，$|\boldsymbol{k}|>k_{\mathrm{F}}$ 的态未被占．因为 $\hat{H}=\hat{H}_0$，所以 Heisenberg 绘景中的算符与相互作用绘景中的算符是相同的．利用二次量子化表象中 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ 的展开式和 (1.2.9)式可以求出，

$$\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}C_{\boldsymbol{k}\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0 t)}$$

自由粒子系统的格林函数记为 $G^0_{\alpha\beta}$，根据定义可以求出

$$\begin{aligned}G^0_{\alpha\beta}(x)&=-\mathrm{i}\langle\Phi_0|T[\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\beta}(0)]|\Phi_0\rangle\\&=-\mathrm{i}\frac{\delta_{\alpha\beta}}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}t)}\quad\begin{cases}1-n^0_{\boldsymbol{k}}, & t>0\\-n^0_{\boldsymbol{k}}, & t<0\end{cases}\end{aligned}\qquad(1.3.39)$$

其中$|\boldsymbol{\Phi}_0\rangle$是自由费密子系统的基态．$n^0_{\boldsymbol{k}}$ 取以下数值

$$n^0_{\boldsymbol{k}}=\langle\Phi_0|C^{+}_{\boldsymbol{k}}C_{\boldsymbol{k}}|\Phi_0\rangle=\begin{cases}1 & ,|\boldsymbol{k}|\leqslant k_{\mathrm{F}}\\0 & ,|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}\end{cases}$$

由(1.3.39)式，$G^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)$可写为

$$\begin{aligned}G^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)&=\int\mathrm{d}^4x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}G^0_{\alpha\beta}(x)\\&=-\mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}\left[\theta(|\boldsymbol{k}|-k_{\mathrm{F}})\int_0^\infty\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}})t}\right.\\&\quad\left.-\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|)\int_0^\infty\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}})t}\right]\end{aligned}$$

$\theta(x)$为阶梯函数

$$\theta(x)=\begin{cases}1 & , x>0\\0 & , x\leqslant 0\end{cases}$$

上式的推导中利用了关系式：

$$n^0_{\boldsymbol{k}}=\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|),\quad 1-n^0_{\boldsymbol{k}}=\theta(|\boldsymbol{k}|-k_{\mathrm{F}}).$$

$G^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)$的表达式中包含如下的积分

$$\int_0^\infty\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}st}$$

这类积分定义为极限

$$\lim_{\delta\to 0}\int_0^\infty dt\, e^{ist-\delta t}=i\lim_{\delta\to 0}\frac{1}{s+i\delta} \tag{1.3.40}$$

分母中的 $i\delta$ 决定绕过极点 $s=0$ 的方式，即

$$\int F(s)\frac{ds}{s+i\delta}=P\int\frac{F(s)}{s}ds-i\pi F(0)$$

此式也可写为

$$\frac{1}{s+i\delta}=\frac{1}{s}-i\pi\delta(s) \tag{1.3.41}$$

用此公式可以求出

$$G^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)=\delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(|\boldsymbol{k}|-k_F)}{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+i\delta}+\frac{\theta(k_F-|\boldsymbol{k}|)}{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-i\delta}\right] \tag{1.3.42}$$

由于第一项和第二项的差别只在于 $i\delta$ 的符号，故可将上式写为

$$G^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)=\frac{\delta_{\alpha\beta}}{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+i\delta\,\mathrm{sgn}(|\boldsymbol{k}|-k_F)} \tag{1.3.43}$$

G^0 的极点正是单粒子的能量 $\omega=\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}$.

四、Lehmann 表示

由量子力学的一般原理可以推导出单粒子格林函数的一些重要性质，这些性质与相互作用的特殊形式无关. 因为玻色系统在 $T=0$ 时要发生凝聚，下面的讨论只限于费密子系统. 格林函数的定义是

$$iG_{\alpha\beta}(x,x')=\langle\Psi_0|T[\hat{\psi}_{H\alpha}(x)\hat{\psi}^+_{H\beta}(x')]|\Psi_0\rangle \tag{1.3.44}$$

一般说来，此式中的 Heisenberg 算符和态矢量是很复杂的，但根据量子力学的一般原理仍可推导出一些重要的结果. 在场算符之间插入 Heisenberg 态矢量的完备组，这些态是 $\hat{H}$ 和 $\hat{N}$ 的共同本征态，但粒子数是可变的. 我们得到

$$
\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x')=\sum_n\Big[\theta(t-t')\langle\Psi_0|\hat{\psi}_{H\alpha}(x)|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\beta}(x')|\Psi_0\rangle
$$

$$
-\theta(t'-t)\langle\Psi_0|\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\beta}(x')|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)|\Psi_0\rangle \tag{1.3.45}
$$

Heisenberg 场算符

$$
\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{O}_{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}
$$

用它可求出 $G_{\alpha\beta}$ 与时间变量$(t-t')$的关系，

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x')=\sum_n\Big[&\theta(t-t')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_n-E)(t-t')}\langle\Psi_0|\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})|\Psi_n\rangle\\
&\cdot\langle\Psi_n|\hat{\psi}^+_{\beta}(\boldsymbol{x}')|\Psi_0\rangle-\theta(t'-t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_n-E)(t-t')}\\
&\cdot\langle\Psi_0|\hat{\psi}^+_{\beta}(\boldsymbol{x}')|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\psi_{\alpha}(\boldsymbol{x})|\Psi_0\rangle\Big]
\end{aligned} \tag{1.3.46}
$$

上式中若$|\Psi_0\rangle$包含 N 个粒子，为使矩阵元不等于零 $|\Psi_n\rangle$ 必须包含 $N\pm1$ 个粒子，因为 $\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})|\Psi_0\rangle$和 $\hat{\psi}^+_{\beta}(x')|\Psi_0\rangle$也是粒子数算符的本征态但本征值分别为 $N-1$ 和 $N+1$， 证明如下. 粒子数算符的定义是

$$
\hat{N}=\int\mathrm{d}^3x\hat{\psi}^+_{\alpha}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})
$$

容易证明

$$
[\hat{N},\hat{\psi}_{\beta}(\boldsymbol{x})]=-\hat{\psi}_{\beta}(\boldsymbol{x})
$$

或写为

$$
\hat{N}\hat{\psi}_{\beta}(\boldsymbol{x})=\hat{\psi}_{\beta}(\boldsymbol{x})(\hat{N}-1)
$$

将此式作用于态$|\Psi_0\rangle$得到

$$
\hat{N}[\hat{\psi}_{\beta}(\boldsymbol{x})|\Psi_0\rangle]=(N-1)[\hat{\psi}_{\beta}(\boldsymbol{x})|\Psi_0\rangle] \tag{1.3.47}
$$

这证明 $\hat{\psi}_{\beta}(\boldsymbol{x})|\Psi_0\rangle$ 是粒子数算符的本态，但粒子数减少 1. 对 $\psi^+_{\beta}(x')|\Psi_0\rangle$可作同样的证明. (1.3.46)式表明，我们必须考虑粒子数不同的系综.

下面考虑比较简单的情况. 假定系统有平移不变性，动量算符与 $\hat{H}$ 对易. 在二次量子化表象中可取平面波为基矢. 动量算符可写为

$$\hat{P}=\int d^3x\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x})(-i\nabla)\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}) \tag{1.3.48}$$

容易证明

$$-i\nabla\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})=[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}),\hat{P}] \tag{1.3.49}$$

它可写为下面的形式

$$\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})=e^{-i\hat{P}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{\psi}_\alpha(0)e^{i\hat{P}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{1.3.50}$$

因为 $\boldsymbol{P}$ 是运动常数，所以完全组态也可取为动量的本征态. 由此可得到

$$\begin{aligned}
&iG_{\alpha\beta}(x,x')\\
&=\sum_n[\theta(t-t')e^{-i(E_n-E)(t-t')}e^{iP_n\cdot(x-x')}\\
&\quad\cdot\langle\Psi_0|\hat{\psi}_\alpha(0)|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\psi_\beta^+(0)|\Psi_0\rangle\\
&\quad-\theta(t'-t)e^{i(E_n-E)(t-t')}e^{-iP_n\cdot(\chi-x')}\\
&\quad\cdot\langle\Psi_0|\hat{\psi}_\beta^-(0)|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle]
\end{aligned} \tag{1.3.51}$$

上式中取 $\hat{P}|\Psi_0\rangle=0$，即基态的总动量等于零. (1.3.51)式说明，G 只依赖于 $(x-x')$. 相应的傅氏变换是

$$\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)&=\int d^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\int d(t-t')e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')+i\omega(t-t')}G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x},x')\\
&=V\sum_n\delta_{\boldsymbol{k},p_n}\frac{\langle\Psi_0|\hat{\psi}_\alpha(0)|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\psi}_\beta^+(0)|\Psi_n\rangle}{\omega-(E_n-E)+i\delta}\\
&\quad+V\sum_n\delta_{\boldsymbol{k},p_n}\frac{\langle\Psi_0|\hat{\psi}_\beta^+(0)|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{\psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle}{\omega+(E_n-E)-i\delta}
\end{aligned} \tag{1.3.52}$$

V 是系统的体积. 式中的 $\pm i\delta$ 是为了保证对 $(t-t')$ 的积分的收敛性而引进的. 第一项要求 $|\Psi_n\rangle$ 的动量等于 $\boldsymbol{k}$，第二项要求 $|\Psi_n\rangle$

的动量等于$-\boldsymbol{k}$. 故上式又可写为

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}\omega)=V\sum_n\left[\frac{\langle\Psi_0|\hat{\psi}_\alpha(0)|n\boldsymbol{k}\rangle\langle n\boldsymbol{k}|\hat{\psi}^+_\beta(0)|\Psi_0\rangle}{\omega-(E_n-E)+\mathrm{i}\delta}+\frac{\langle\Psi_0|\hat{\psi}^+_\beta(0)|n,-\boldsymbol{k}\rangle\langle n,-\boldsymbol{k}|\hat{\psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle}{\omega+(E_n-E)-\mathrm{i}\delta}\right] \tag{1.3.53}$$

这样,我们便求出了格林函数与频率的关系,ω 只出现在分母中.

上式第一项的中间态有$(N+1)$个粒子,其分母可写为

$$\begin{aligned}&\omega-[E_n(N+1)-E(N)]\\&=\omega-[E_n(N+1)-E(N+1)]-[E(N+1)-E(N)]\end{aligned} \tag{1.3.54}$$

$E(N+1)-E(N)$ 是加进一个粒子后基态能量的变化. 因为系统的体积是常数,这个变化正是化学势. 而 $E_n(N+1)-E(N+1)=\varepsilon_n(N+1)$是$(N+1)$ 个粒子系统的激发能. 由定义 $\varepsilon_n(N+1)$大于或等于零. 同理,第二项的分母为

$$\begin{aligned}&\omega+[E_n(N-1)-E(N)]\\&=\omega-[E(N)-E(N-1)]+[E_n(N-1)-E(N-1)]\\&=\omega-\mu+\varepsilon_n(N-1)\end{aligned} \tag{1.3.55}$$

式中 μ 也是化学势(准确到 N^{-1}). 取热力学极限: $N\to\infty$、$V\to\infty$、$\dfrac{N}{V}\to$常数,则有

$$\mu(N+1)=\mu(N)+O(N^{-1}) \tag{1.3.56}$$

用(1.3.54)和(1.3.55)式可将 $G_{\alpha\beta}$ 写为

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)=V\sum_n\left[\frac{\langle\Psi_0|\hat{\psi}_\alpha(0)|n\boldsymbol{k}\rangle\langle n\boldsymbol{k}|\hat{\psi}^+_\beta(0)|\Psi_0\rangle}{\omega-\mu-\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}(N+1)+\mathrm{i}\delta}+\frac{\langle\Psi_0|\hat{\psi}^+_\beta(0)|n,-\boldsymbol{k}\rangle\langle n,-\boldsymbol{k}|\hat{\psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle}{\omega-\mu+\varepsilon_{n,-\boldsymbol{k}}(N-1)-\mathrm{i}\delta}\right] \tag{1.3.57}$$

现在讨论(1.3.57)式如何简化到自由费密子的 $G^0_{\alpha\beta}$ 的公式(1.3.43). 先证明若 $|\Phi_0\rangle$ 是 $\hat{H}_0$ 的本征态，则 $C_{\boldsymbol{k}\alpha}|\Phi_0\rangle$ 也是 $\hat{H}_0$ 的本征态. 可以证明

$$[\hat{H}_0, C_{\boldsymbol{k}\alpha}] = -\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} C_{\boldsymbol{k}\alpha} \tag{1.3.58}$$

所以

$$\hat{H}_0 C_{\boldsymbol{k}\alpha} = C_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{H}_0 - \varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} C_{\boldsymbol{k}\alpha}$$

如果

$$\hat{H}_0|\Phi_0\rangle = E_0|\Phi_0\rangle$$

则有

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 C_{\boldsymbol{k}\alpha}|\Phi_0\rangle &= (C_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{H}_0 - \varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} C_{\boldsymbol{k}\alpha})|\Phi_0\rangle \\ &= (E_0 - \varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}) C_{\boldsymbol{k}\alpha}|\Phi_0\rangle \end{aligned} \tag{1.3.59}$$

即 $C_{\boldsymbol{k}\alpha}|\Phi_0\rangle$ 也是 $\hat{H}_0$ 的本征态，但能量是 $E_0-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}$. 同理可证 $C^+_{\boldsymbol{k}\alpha}|\Phi_0\rangle$ 也是 $\hat{H}_0$ 的本征态，本征值是 $E_0+\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}$. 将(1.3.57)式中的场算符写为

$$\hat{\psi}_\alpha(0) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} C_{\boldsymbol{k}\alpha}$$

$$\hat{\psi}^+_\beta(0) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} C^+_{\boldsymbol{k}\beta}$$

(1.3.57)式中的求和是对激发态求和. 第一项的分子可写为

$$\frac{1}{V}\sum_n \langle\Phi_0|\sum_{\boldsymbol{k}_1} C_{\boldsymbol{k}_1\alpha}|n\boldsymbol{k}\rangle\langle n\boldsymbol{k}|\sum_{\boldsymbol{k}_2} C^+_{\boldsymbol{k}_2\beta}|\Phi_0\rangle$$

其中 $C^+_{\boldsymbol{k}\beta}|\Phi_0\rangle$ 也是 $\hat{H}_0$ 的本征态. $|n\boldsymbol{k}\rangle$ 是 $(N+1)$ 个粒子的动量是 $\boldsymbol{k}$ 的激发态，即 $C^+_{\boldsymbol{k}\alpha}|\Phi_0\rangle$. 对 n 的求和中只有一项，即

$$\langle n\boldsymbol{k}|C^+_{\boldsymbol{k}_2\beta}|\Phi_0\rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}_2}\theta(|\boldsymbol{k}|-k_F)$$

同理可以证明

$$\langle\Phi_0|C_{\boldsymbol{k}_1\alpha}|n\boldsymbol{k}\rangle = \delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_1}\theta(|\boldsymbol{k}|-k_F)$$

(1.3.57)式第一项求和的结果，其分子为

$$\frac{1}{V}\delta_{\alpha\beta}\theta(|\boldsymbol{k}|-k_{\mathrm{F}})$$

这一项分母中的激发能是

$$E_{\boldsymbol{k}}(N+1)-E(N+1)=\varepsilon_{\boldsymbol{k}}(N+1)=\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu$$

(1. 3. 57)式的第二项相应于费密面下面的空穴，场算符的矩阵元变为

$$\langle\Phi_0|\psi_{\beta}^{+}(0)|n,-\boldsymbol{k}\rangle\langle n,-\boldsymbol{k}|\psi_{\alpha}(0)|\Phi_0\rangle=\frac{1}{V}\delta_{\alpha\beta}\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|)$$

第二项的分母可算出为 $\mu-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}$. 这样，便可得到(1. 3. 42).

对有粒子间相互作用的系统，$C_{\boldsymbol{k}\alpha}^{+}|\Psi_0\rangle$和 $C_{\boldsymbol{k}\alpha}|\Psi_0\rangle$都不是 $\hat{H}$ 的本征态，但可展开为 $\hat{H}$ 的本征态$|n\rangle$的线性叠加，$|n\rangle$是 $\hat{H}$ 的激发态，(1. 3. 57)式就是对基发态和基态求和.

现在讨论 G 的解析性质. $G(\boldsymbol{k},\omega)$ 是 ω 的半纯函数. (若复变函数 $f(z)$ 除了个别的孤立极点外在全平面上单值正则，则称 $f(z)$ 为半纯函数.) 它的单极点等于相互作用系统的激发能. 当频率小于 μ 时，这些极点在实轴的上面；频率大于 μ 时在实轴的下面，如图 1. 3所示. 格林函数的奇异性直接给出激发态的能量.

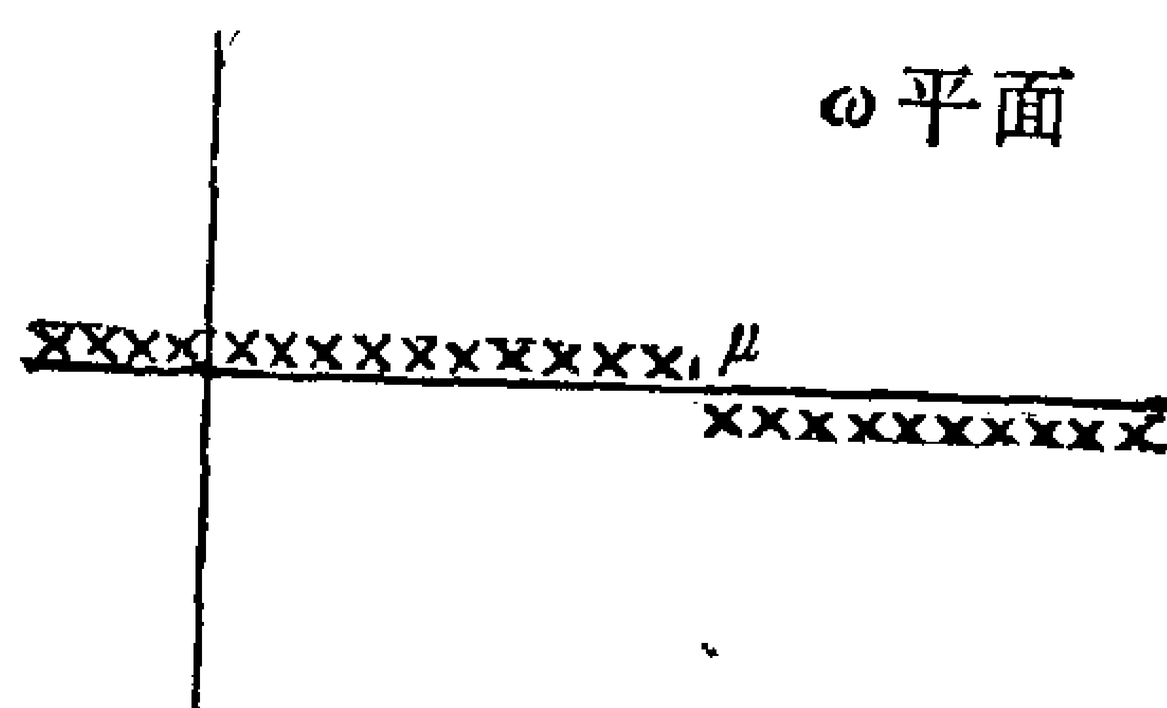


图 1.3　$G(\boldsymbol{k},\omega)$在复数ω平面上的奇异性

由上面的讨论可以看出，格林函数既不是上半平面的解析函数，也不是下半平面的解析函数. 作回路积分时一般考虑上半平面或下半平面的解析函数比较方便. 因此定义下面的推迟和超前

格林函数，分别用R 和A 标明.

$$iG^{R}_{\alpha\beta}(x,x')=\langle\Psi_0|\{\hat{\psi}_{H\alpha}(x),\hat{\psi}^{+}_{H\beta}(x')\}|\Psi_0\rangle\theta(t-t') \tag{1.3.60}$$

$$iG^{A}_{\alpha\beta}(x,x')=-\langle\Psi_0|\{\hat{\psi}_{H\alpha}(x),\hat{\psi}^{+}_{H\beta}(x')\}|\Psi_0\rangle\theta(t'-t) \tag{1.3.61}$$

上式中的花括弧表示反对易. 这些函数的分析和前面引入的编时格林函数的分析完全相同. 对均匀系统得到下面的 Lehmann 表示

$$G^{RA}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)=V\sum_{n}\left[\frac{\langle\Psi_0|\hat{\psi}_{\alpha}(0)|n\boldsymbol{k}\rangle\langle n\boldsymbol{k}|\psi^{+}_{\beta}(0)|\Psi_0\rangle}{\omega-\mu-\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}(N+1)\pm i\delta}\right.$$
$$\left.+\frac{\langle\Psi_0|\hat{\psi}^{+}_{\beta}(0)|n,-\boldsymbol{k}\rangle\langle n,-\boldsymbol{k}|\hat{\psi}_{\alpha}(0)|\Psi_0\rangle}{\omega-\mu+\varepsilon_{n,-\boldsymbol{k}}(N-1)\pm i\delta}\right] \tag{1.3.62}$$

G^{R}, G^{A} 也是 ω 的半纯函数. G^{R} 是上半平面的解析函数， 其所有的极点都在下半平面. G^{A} 是下半平面的解析函数，其所有的极点都在上半平面. 由(1.3.57) 及(1.3.62)式可以推导出下面的关系

$$\mathrm{Re}G_{\alpha\beta}=\mathrm{Re}G^{R}_{\alpha\beta}=\mathrm{Re}G^{A}_{\alpha\beta}$$
$$\mathrm{Im}G^{R}_{\alpha\beta}=\mathrm{sgn}(\omega-\mu)\mathrm{Im}G_{\alpha\beta}$$
$$\mathrm{Im}G^{A}_{\alpha\beta}=-\mathrm{sgn}(\omega-\mu)\mathrm{Im}G_{\alpha\beta}$$

由此可得

$$G^{R}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)=\begin{cases}G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega) & \omega>\mu\\ G^{*}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega) & \omega<\mu\end{cases}$$

$$G^{A}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)=\begin{cases}G^{*}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega), & \omega>\mu\\ G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega), & \omega<\mu\end{cases} \tag{1.3.63}$$

以及

$$[G^{R}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)]^{*}=G^{A}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega) \tag{1.3.64}$$

若相互作用与自旋无关且无外磁场，则 $G_{\alpha\beta}$ 是对角的，$G_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}G$．这时 $G^{R}_{\alpha\beta}$、$G^{A}_{\alpha\beta}$ 也是对角的．G 可以表示为 $G=(2s+1)^{-1}G_{\alpha\alpha}$，重复的自旋坐标表示求和．

由于所讨论的是有大量粒子的系统，它们的状态非常稠密，状态对能量的分布可以认为是连续的．令 dn 代表 $\varepsilon<\varepsilon_{nk}<\varepsilon+\mathrm{d}\varepsilon$ 之间的能级数，则上面有关的求和可以写为

$$\begin{aligned}&(2s+1)^{-1}V\sum_{n}|\langle n\boldsymbol{k}|\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(0)|\Psi_{0}\rangle|^{2}\\ &\approx(2s+1)^{-1}V\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon|\langle n\boldsymbol{k}|\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(0)|\Psi_{0}\rangle|^{2}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\varepsilon}\\ &=\int\mathrm{d}\varepsilon A(\boldsymbol{k},\varepsilon)\end{aligned} \tag{1.3.65}$$

同理有

$$(2s+1)^{-1}V\sum_{n}|\langle n,-\boldsymbol{k}|\psi_{\alpha}(0)|\Psi_{0}\rangle|^{2}=\int\mathrm{d}\varepsilon B(\boldsymbol{k},\varepsilon) \tag{1.3.66}$$

单粒子格林函数可以写为

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=\int\mathrm{d}\omega'\left[\frac{A(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega-\mu-\omega'+\mathrm{i}\delta}+\frac{B(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega-\mu+\omega'-\mathrm{i}\delta}\right] \tag{1.3.67}$$

现在，在复 ω 平面上 G 有一条割线．无限体积极限改变了$G(\boldsymbol{k},\omega)$的解析性质，使分立的极点变成了割线．$A(\boldsymbol{k},\omega)$、$B(\boldsymbol{k},\omega)$称为谱函数．将 $G(\boldsymbol{k},\omega)$用谱函数表示，量子场论中称为Lehmann表示，用它可以讨论 $G(\boldsymbol{k},\omega)$的解析性质和色散关系．

利用公式

$$\frac{1}{x\pm\mathrm{i}\eta}=\frac{P}{x}\mp\mathrm{i}\pi\delta(x)$$

对(1.3.67)式两边取虚数部分，有

$$\mathrm{Im}G(\boldsymbol{k},\omega)=-\pi A(\boldsymbol{k},\omega-\mu)+\pi B(\boldsymbol{k},\mu-\omega)$$

因为 $\omega<0$ 时 $A(\boldsymbol{k},\omega)=B(\boldsymbol{k},\omega)=0$，所以有

$$\mathrm{Im}G(\boldsymbol{k},\omega)=\begin{cases}-\pi A(\boldsymbol{k},\omega-\mu), & \omega>\mu\\ \pi B(\boldsymbol{k},\mu-\omega), & \omega<\mu\end{cases} \tag{1.3.68}$$

因此，当 ω 沿实轴变化时（对固定的 $\boldsymbol{k}$）$G(\boldsymbol{k},\omega)$ 的虚数部分在 $\omega=\mu$ 点有不连续性.

对自由费密子系统，比较(1.3.42)和(1.3.67)式得到

$$A^0(\boldsymbol{k},\omega)=\delta[\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu)](1-n_{\boldsymbol{k}}^0) \tag{1.3.69}$$

$$B^0(\boldsymbol{k},\omega)=\delta[\omega-(\mu-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0)]n_{\boldsymbol{k}}^0$$

从以上推导过程还可得到下面的关系

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{k},t)&=-\mathrm{i}\int_0^\infty \mathrm{d}\omega A(\boldsymbol{k},\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega+\mu)t}, \quad t>0\\ G(\boldsymbol{k},t)&=\mathrm{i}\int_0^\infty \mathrm{d}\omega B(\boldsymbol{k},\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega-\mu)t}, \quad t<0\end{aligned} \tag{1.3.70}$$

推迟和超前格林函数也可以用谱函数表示为

$$G^{\mathrm{R,A}}(\boldsymbol{k},\omega)=\int_0^\infty \mathrm{d}\omega'\left[\frac{A(\boldsymbol{k},\omega)}{\omega-\mu-\omega'\pm\mathrm{i}\delta}+\frac{B(\boldsymbol{k},\omega)}{\omega-\mu+\omega'\pm\mathrm{i}\delta}\right] \tag{1.3.71}$$

这表明，若知道 A 和 B 就可求出所有三个格林函数.

$|\omega|\to\infty$ 时，这些格林函数有简单的渐近性质. 考虑下式

$$\langle\Psi_0|\{\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}),\hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}')\}|\Psi_0\rangle=\delta_{\alpha\beta}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{1.3.72}$$

作类似于(1.3.51)式的分析可以推导出

$$\begin{aligned}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=(2s+1)^{-1}\sum_n[&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_n\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}|\langle\Psi_n|\hat{\psi}_\alpha^+(0)|\Psi_0\rangle|^2\\ &+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_n\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}|\langle\Psi_n|\hat{\psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2]\end{aligned}$$

对 $(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$ 作傅氏变换并利用(1.3.65)式(1.3.66)式可以得到

$$1=(2s+1)^{-1}V\sum_n[|\langle n\boldsymbol{k}|\hat{\psi}_\alpha^+(0)|\Psi_0\rangle|^2+|\langle n,-\boldsymbol{k}|\hat{\psi}_\alpha(0)|\Psi_0\rangle|^2]$$
$$=\int_0^\infty d\omega[A(\boldsymbol{k},\omega)+B(\boldsymbol{k},\omega)]$$

$|\omega|\to\infty$ 时由(1.3.67)式(1.3.71)式得到

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=G^R(\boldsymbol{k},\omega)=G^A(\boldsymbol{k},\omega)$$
$$=\frac{1}{\omega}\int_0^\infty d\omega'[A(\boldsymbol{k},\omega')+B(\boldsymbol{k}',\omega')]=\frac{1}{\omega}$$
$$|\omega|\to\infty \qquad (1.3.73)$$

对任意相互作用系统，这个结果都是正确的.

五、极点的物理意义

我们已经知道，由格林函数可以求出多粒子系统的许多物理量.下面以费密子系统为例说明格林函数极点与元激发谱的关系.

设在时刻 t' 给系统加了一个动量是 $\boldsymbol{k}$ 的粒子. 在相互作用绘景中系统的态矢量是

$$C_{\boldsymbol{k}\mathrm{I}}^+(t')|\Psi_\mathrm{I}(t')\rangle$$

在时刻 $t,t>t'$,这个态演化为

$$\hat{U}(t,t')C_{\boldsymbol{k}\mathrm{I}}^+(t')|\Psi_\mathrm{I}(t')\rangle$$

现在求 t 时刻系统处于与 t' 时刻相同的态的几率. 其几率振幅是

$$\langle\Psi_\mathrm{I}(t)|C_{\boldsymbol{k}\mathrm{I}}(t)\hat{U}(t,t')C_{\boldsymbol{k}\mathrm{I}}^+(t')|\Psi_\mathrm{I}(t')\rangle$$
$$=\langle\Psi_\mathrm{H}^0|C_{\boldsymbol{k}\mathrm{H}}(t)C_{\boldsymbol{k}\mathrm{H}}^+(t')|\Psi_\mathrm{H}^0\rangle=\mathrm{i}G(\boldsymbol{k},t-t'),\quad t>t'$$

这正是 $t>t'$ 时的格林函数,它描写动量为 $\boldsymbol{k}$ 的粒子从 t' 到 t 的传播. 为了简单，上面略去了自旋坐标. 将 $G(\boldsymbol{k},t-t')$ 记为 $G(\boldsymbol{k},t)$. 为了求出函数 $G(\boldsymbol{k},t)$ 需要计算积分

$$G(\boldsymbol{k},t)=\int_{-\infty}^\infty\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}G(\boldsymbol{k},\omega) \qquad (1.3.74)$$

上式中 $t>0$，故可将积分回路形变到下半ω平面．将积分分为两部分

$$G(\boldsymbol{k},t)=\int_{-\infty}^{\mu}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}G(\boldsymbol{k},\omega)+\int_{\mu}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}G(\boldsymbol{k},\omega)$$

(1.3.75)

第一项中$(\omega<\mu)G$ 与 G^{A} 重合，积分变为

$$\int_{-\infty}^{\mu}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}G(\boldsymbol{k},\omega)=\int_{-\infty}^{\mu}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega) \qquad (1.3.76)$$

G^{A} 是下半平面的解析函数，积分回路可由 C_1 形变到 C_1'. $|\omega|\to\infty$ 时 $G^{\mathrm{A}}\propto\frac{1}{\omega}$，约当引理保证圆弧上的供献等于零．上式简化为

$$\int_{-\infty}^{\mu}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}G(\boldsymbol{k},\omega)=\int_{\mu-\mathrm{i}\infty}^{\mu}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega) \qquad (1.3.77)$$

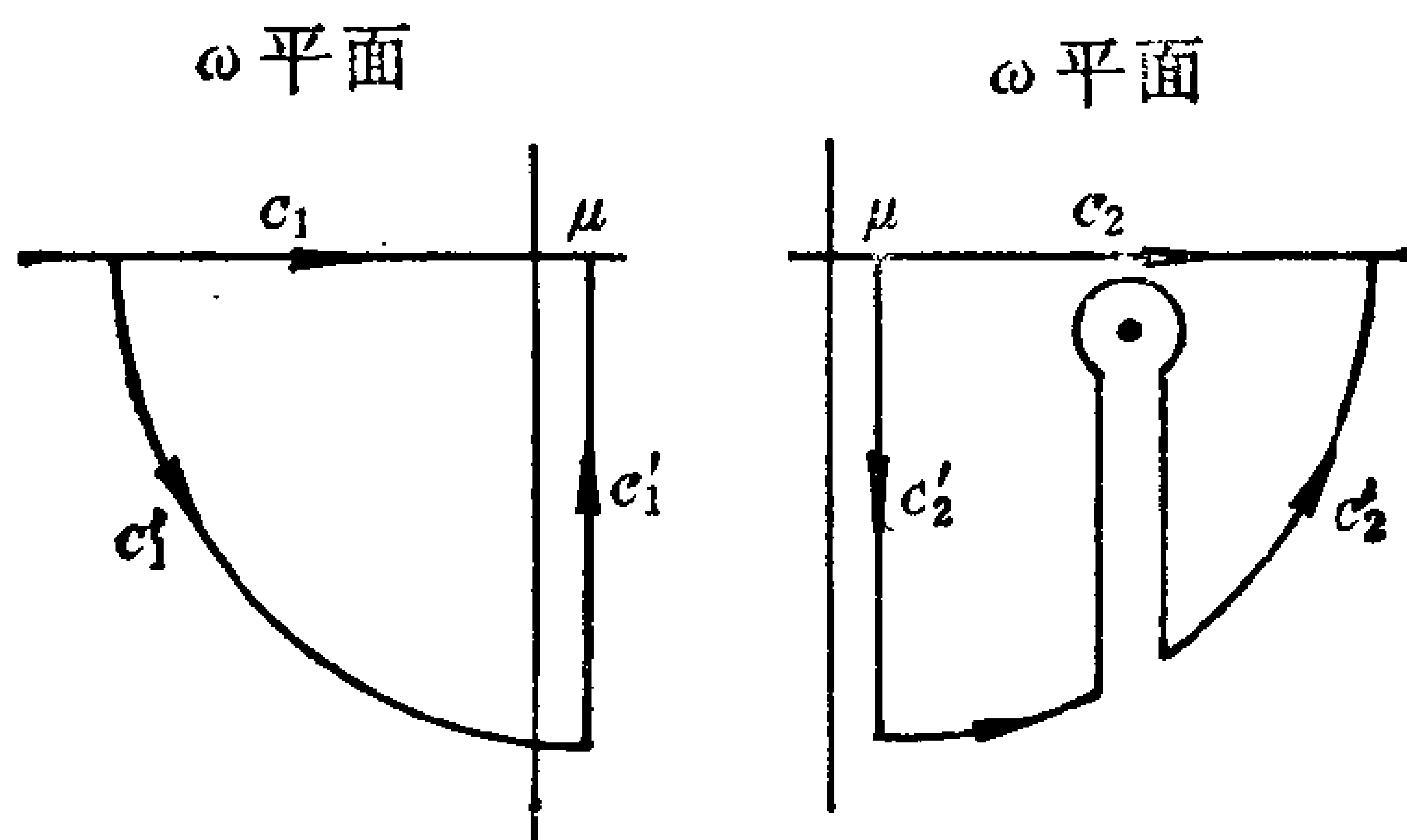


图 1.4　$t>0$ 时计算 $G(\boldsymbol{k},t)$的回路

(1.3.75)式的第二项可用相同方法处理．$\omega>\mu$ 时 $G(\boldsymbol{k},\omega)$ 与 $G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$重合．但 $G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$不是下半平面的解析函数，在下半平面有极点．假定 $G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$在下半平面靠近实轴的地方有一单极点 $\omega=\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\mathrm{i}\gamma_{\boldsymbol{k}}$，其留数是 α，$\varepsilon_{\boldsymbol{k}}>\mu$，$\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu\gg\gamma_{\boldsymbol{k}}\geqslant 0$．回路 C_2 可形变到 C_2'．圆弧上的积分等于零．因此有

$$\int_{\mu}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}G(\boldsymbol{k},\omega)=\int_{\mu}^{\mu-\mathrm{i}\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$$
$$-\mathrm{i}\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_{\boldsymbol{k}}t-\gamma_{\boldsymbol{k}}t} \qquad (1.3.78)$$

把(1.3.77)式(1.3.78)式联合起来有

$$G(\boldsymbol{k},t)=\int_{\mu-\mathrm{i}\infty}^{\mu}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}[G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)-G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)]$$

$$-\mathrm{i}a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_{\boldsymbol{k}}t-\gamma_{\boldsymbol{k}}t} \tag{1.3.79}$$

若 t 取适当的数值则(1.3.79)式中的积分可以忽略. 这时包含一个附加粒子的态的传播像一个近似的本征态，其频率为 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}$，阻尼常数为 $\gamma_{\boldsymbol{k}}$. 准确地说，如果

$$1,\quad |t|(\varepsilon_k-\mu)\geqslant 1$$

$$2,\quad |t|\gamma_{\boldsymbol{k}}\leqslant 1$$

则有

$$\mathrm{i}G(\boldsymbol{k},t)\approx a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_{\boldsymbol{k}}t-\gamma_{\boldsymbol{k}}t} \tag{1.3.80}$$

以上讨论包含条件 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu\gg\gamma_{\boldsymbol{k}}$，因此极点必须很靠近实轴. 对自由粒子系统，重复以上过程得到的结果为 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}t}$. 与(1.3.80)式比较可以看出，时刻 t' 加入一个粒子后的态的传播像一个准粒子，其能量是 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}$，并按 $\mathrm{e}^{-\gamma_{\boldsymbol{k}}(t-t')}$ 随时间衰减. 因此，准粒子的能量和衰减由 G^{R} 在下半平面的极点的实部和虚部决定. 泡包的振幅则与 G^{R} 在极点的留数有关.

对于略去的积分估计如下. 在极点附近有

$$G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)\approx\frac{a}{\omega-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}+\mathrm{i}\gamma_{\boldsymbol{k}}}$$

$$G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=[G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)]^{*}\approx\frac{a}{\omega-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\mathrm{i}\gamma_{\boldsymbol{k}}}$$

(1.3.79)式中的积分为

$$\int_{\mu-\mathrm{i}\infty}^{\mu}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}[G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)-G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)]$$

$$\approx 2\mathrm{i}\,\gamma_{\boldsymbol{k}}a\int_{\mu-\mathrm{i}\infty}^{\mu}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{(\omega-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})^{2}+\gamma_{\boldsymbol{k}}^{2}}$$

$$
=-\frac{\gamma_{k}a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t}}{\pi}\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}u\frac{\mathrm{e}^{-ut}}{\gamma_{k}^{2}+[(\mu-\varepsilon_{k})-\mathrm{i}u]^{2}}
$$

$$
\approx-\frac{\gamma_{k}a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t}}{\pi t(\mu-\varepsilon_{k})^{2}}\ll-iae^{-\mathrm{i}\varepsilon_{k}t-\gamma_{k}t} \qquad (1.3.81)
$$

上式第三行作了变换 $u=i(\omega-\mu)$. 根据讨论开始的假设条件和 $\gamma_k\ll(\varepsilon_k-\mu)$即可得到最后的结果.

对空穴的传播可作相似的讨论. 其结论是: 空穴的能量和衰减由 G^{A} 在上半平面的极点决定. 还须指出,粒子和空穴的 γ' 符号是相反的.

现在讨论准粒子与谱函数 $A(\boldsymbol{k}\omega)$的关系. $t>0$ 时有

$$
G(\boldsymbol{k},t)=-\mathrm{i}\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}\omega A(\boldsymbol{k},\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega+\mu)t} \qquad t>0
$$

对自由粒子系统

$$
A^{0}(\boldsymbol{k},\omega)=\delta[\omega-(\varepsilon_{k}^{0}-\mu)](1-n_{\boldsymbol{k}}^{0})
$$

将 δ 函数写为

$$
\delta[\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu)]\approx\frac{1}{\pi}\frac{\Gamma}{[\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu)]^{2}+\Gamma^{2}}
$$

$$
=\frac{1}{2\pi}\left\{\frac{\mathrm{i}}{\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu)+\mathrm{i}\Gamma}-\frac{\mathrm{i}}{\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu)-\mathrm{i}\Gamma}\right\}
$$

其中 $\Gamma\to0$. 用前面的计算方法可以证明

$$
G^{0}(\boldsymbol{k},t)\propto\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}t}
$$

这时 $G^0(\boldsymbol{k},t)$ 描写动量是 $\boldsymbol{k}$的粒子的传播,且没有衰减.

粒子之间有相互作用时, $A(\boldsymbol{k},\omega)$不再是一个简单的 δ 函数,它的特性由矩阵元$\langle\Psi_n|C_{\boldsymbol{k}}^{+}|\Psi_0\rangle$决定,一般情况下是很复杂的. 因为 $C_{\boldsymbol{k}}^{+}|\Psi_0\rangle$并不是 $N+1$ 粒子系统的本征态, 而是许多本征态的叠加, 能量也扩展到一定范围. 因此加进一个粒子得到的态必然有有限寿命, 其传播也受到阻尼. 假定有相互作用时 $A(\boldsymbol{k},\omega)$在 $\omega=\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu$ 处仍有一个峰值. $A(\boldsymbol{k},\omega)$离实轴最近的极点是 $\omega=$

$\varepsilon_k-\mu-\mathrm{i}\Gamma$，其留数是 $A_k/2\pi$. 因为 ω 在实轴上时 $A(\boldsymbol{k},\omega)$ 是实数，因此必然有另一极点位于 $\omega=\varepsilon_k-\mu+\mathrm{i}\Gamma$，留数是 $A_k^*/2\pi$，即

$$A(\boldsymbol{k},\omega)\approx\frac{A_k/2\pi}{\omega-[\varepsilon_k-\mu-\mathrm{i}\Gamma_k]}+\frac{A_k^*/2\pi}{\omega-(\varepsilon_k-\mu+\mathrm{i}\Gamma_k)}+\cdots$$

…表示其它极点的贡献. 和自由粒子系统的 $A^0(\boldsymbol{k},\omega)$ 比较可以看出，对弱相互作用，Γ_k 应很小于 $\varepsilon_k-\mu$，A_k、A_k^* 应该是纯虚数. 将 $A(\boldsymbol{k},\omega)$ 写为

$$A(\boldsymbol{k},\omega)\approx\frac{1}{\pi}\frac{[\omega-(\varepsilon_k-\mu)]\mathrm{Re}A_k+\Gamma_k\mathrm{Im}A_k}{[\omega-(\varepsilon_k-\mu)]^2+\Gamma_k^2}$$

完成对 ω 的回路积分得到

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{k},t)=&-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_k t-\Gamma_k t}A_k\\&-\frac{\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t}}{\pi}\left\{\mathrm{Re}A_k\int_0^{-i\infty}\mathrm{d}\omega\frac{[\omega-(\varepsilon_k-\mu)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{[\omega-(\varepsilon_k-\mu)]^2+\Gamma^2_k}\right.\\&\left.+\mathrm{Im}A_k\Gamma_k\int_0^{-i\infty}\mathrm{d}\omega\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{[\omega-(\varepsilon_k-\mu)]^2+\Gamma_k^2}\right\}\end{aligned}$$

可以证明，当 $|t|(\varepsilon_k-\mu)\geqslant1$、$|t|\Gamma_k\leqslant1$ 时，等式右边的积分可以忽略. 这样我们得到重要结论，即 $A(\boldsymbol{k},\omega)$ 在下半平面靠近实轴的极点给出准粒子的能量和衰减. 同理可以证明，$B(\boldsymbol{k},\omega)$ 在上半平面的极点给出准空穴的能量和衰减.

这个结论与前面证明的格林函数 G 与准粒子的关系是一致的. 因为

$$\begin{aligned}A(\boldsymbol{k},\omega)&=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(\boldsymbol{k},\omega+\mu)\qquad\omega>0\\&=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G(\boldsymbol{k},E)\\&=-\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}[G(\boldsymbol{k},E)-G^*(\boldsymbol{k},E)]\end{aligned}$$

其中 $E=\omega+\mu$. 因为 $E>\mu$ 时 $G^*(\boldsymbol{k},E)$ 是下半平面的解析函数，因此准粒子（$|\boldsymbol{k}|>k_F$）的能量和衰减就是由 G 在下半平面的极点

决定. 对准空穴可作相似的证明.

§1.4 Wick 定理

§1.3 节介绍了准粒子的能量和寿命与格林函数极点的关系. 要具体得到准粒子能谱, 需要求出格林函数. 格林函数是 Heisenberg 算符对准确基态的矩阵元, 这个形式不便于作具体计算. 作微扰计算时须要变换到相互作用绘景. 根据(1.2.48)式可将格林函数在相互作用绘景中写出

$$G_{\alpha\beta}(x, y) = -\mathrm{i}\frac{\langle \Phi_0 | T[\hat{\psi}_\alpha(x)\psi^+_\beta(y)S(\infty, -\infty)] | \Phi_0\rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0\rangle} \tag{1.4.1}$$

其中

$$\begin{aligned} S(\infty, -\infty) &= T\exp\left\{-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty} \hat{H}_1(t)\mathrm{d}t\right\} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_n T[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)] \end{aligned} \tag{1.4.2}$$

$\hat{H}_1(t)$是相互作用绘景中的算符. (1.4.1)式中的场算符 $\hat{\psi}$、ψ^+ 等也是相互作用绘景中的算符, 为书写方便本节及 §1-5 节将略去角标 I. ψ 服从自由粒子系统的运动方程(1.2.8). 下面以双粒子相互作用为例讨论格林函数的微扰展开. 这时 $\hat{H}_1(t_1)$是

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(t_1) = \frac{1}{2}\int &\mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_1'\hat{\psi}^+_\alpha(\boldsymbol{x}_1t_1)\hat{\psi}^+_\beta(\boldsymbol{x}_1't_1) \\ &V(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_1')_{\alpha\alpha', \beta\beta'}\hat{\psi}_{\beta'}(\boldsymbol{x}_1't_1)\hat{\psi}_{\alpha'}(\boldsymbol{x}, t) \end{aligned}$$

为了方便, 将时间、空间变量写成对称的形式, 即引入

$$U_{\alpha\alpha', \beta\beta'}(x_1-x_1') = V(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_1')_{\alpha\alpha', \beta\beta'}\delta(t_1-t_1') \tag{1.4.3}$$

则有

$$\int \hat{H}_1(t_1)\mathrm{d}t_1$$
$$=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_1'\hat{\psi}_\alpha^+(x_1)\hat{\psi}_\beta^+(x_1')U(x_1-x_1')_{\alpha\alpha',\beta\beta'}\hat{\psi}_{\beta'}(x_1')\hat{\psi}_{\alpha'}(x_1) \tag{1.4.4}$$

格林函数的级数展开可写为

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(x,y) &= \frac{-\mathrm{i}}{\langle\Phi_0|S|\Phi_0\rangle}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_n\langle\Phi_0|T \\ &\quad\times[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(y)\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)]|\Phi_0\rangle \end{aligned} \tag{1.4.5}$$

由此看出，我们必须计算若干产生算符和消灭算符T乘积对自由粒子系统基态$|\Phi_0\rangle$的平均值，如

$$\langle\Phi_0|T[\hat{\psi}^+\cdots\hat{\psi}\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(y)]|\Phi_0\rangle$$

分析这些乘积要用 Wick 定理. 推导 Wick 定理的主要概念是把所有消灭算符移到产生算符的右边. 消灭算符对$|\Phi_0\rangle$作用的结果是零. 在移动过程中产生附加的项，这些附加项正比于一些在移动过程中交换位置的算符的对易括弧或反对易括弧.

$\hat{\psi}(x)$ 可分为消灭部分 $\hat{\psi}_+(x)$ 和产生部分 $\hat{\psi}_-(x)$，

$$\hat{\psi}(x)=\hat{\psi}_+(x)+\hat{\psi}_-(x) \tag{1.4.6}$$

$$\hat{\psi}_+(x)|\Phi_0\rangle=0 \tag{1.4.7}$$

其共轭算符分解为

$$\hat{\psi}^+(x)=\hat{\psi}_+^+(x)+\hat{\psi}_-^+(x) \tag{1.4.8}$$

$$\hat{\psi}_-^+(x)|\Phi_0\rangle=0 \tag{1.4.9}$$

$\hat{\psi}_+(x)$、$\hat{\psi}_-^+(x)$ 是消灭部分而 $\hat{\psi}_-(x)$、$\hat{\psi}_+^+(x)$ 是产生部分. 作为这种分解的例子，考虑自由费密子场算符的分解

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_\alpha(x) &= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{|\boldsymbol{k}|>k_F}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}a_{\boldsymbol{k}\alpha}+\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_F}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}b_{-\boldsymbol{k}\alpha}^+ \\ &= \hat{\psi}_+(x)+\hat{\psi}_-(x) \end{aligned} \tag{1.4.10}$$

对 $\hat{\psi}^+(x)$可作类似的分解. 这样重新定义的消灭算符对自由粒子系统基态$|\Phi_0\rangle$作用的结果等于零,使$|\Phi_0\rangle$类似于量子场论中的真空态.

表述 Wick 定理须要引入下面一些定义.

1. T乘积　其定义前面已经引入.它将时间最迟的算符排在左边. 费密子每交换一次位置引入一个 (-1) 因子. 在编时乘积符号$T(\cdots)$的内部,所有的费密子都可以反对易,所有的玻色子都可以对易.

2. 正规乘积　设 $\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\cdots$是一系列产生算符和消灭算符,用符号 $N(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\cdots)$表示它们的正规乘积,其定义是

$$N(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\cdots)=(-1)^P\hat{A}'\hat{B}'\hat{C}'\hat{D}'\cdots \tag{1.4.11}$$

上式右方的$\hat{A}'\hat{B}'\hat{C}'\hat{D}'\cdots$是左方的算符$\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\cdots$按一定次序的排列. 在$\hat{A}'\hat{B}'\hat{C}'\hat{D}'\cdots$中所有的消灭算符排在产生算符的右边. P是将 $\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\cdots$排成 $\hat{A}'\hat{B}'\hat{C}'\hat{D}'\cdots$ 的次序时需要将其中费密子算符交换的次数.不难看出,在正规乘积符号 $N(\cdots)$的内部,所有费密子算符都可以反对易,所有玻色子算符都可以对易.对(1.4.6)式和(1.4.8)式引入的算符有:

$$N[\hat{\psi}_+(x)\hat{\psi}_-(x)]=-\hat{\psi}_-(x)\hat{\psi}_+(x)$$
$$N[\hat{\psi}_+(x)\hat{\psi}^+_+(x)]=-\hat{\psi}^+_+(x)\hat{\psi}_+(x)$$

场算符正规乘积对$|\Phi_0\rangle$的期望值等于零. 为了求出算符T乘积对$|\Phi_0\rangle$ 的平均值,必须把它化简为相应的N乘积,并找出化简过程中引入的附加项. T乘积和N乘积都服从分配律,如

$$N[(\hat{A}+\hat{B})(\hat{C}+\hat{D})\cdots]$$
$$=N(\hat{A}\hat{C}\cdots)+N(\hat{A}\hat{D}\cdots)+N(\hat{B}\hat{C}\cdots)+N(\hat{B}\hat{D}\cdots)+\cdots$$

因此对场算符 ψ、ψ^+ 只需要分别对其产生部分和消灭部分证明 Wick 定理就可以了.

3. 收缩　两个算符 $\hat{U}$、$\hat{V}$ 的收缩用$\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot}$表示, 其定义是

$$\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot}=T(\hat{U}\hat{V})-N(\hat{U}\hat{V}) \tag{1.4.12}$$

它代表将编时乘积重新排列为正规乘积时引入的附加项，对不同的算符时序其收缩是不同的．容易证明下面各项的收缩等于零．

$$\hat{\psi}_{+}^{\cdot}\hat{\psi}_{-}^{\cdot}=\hat{\psi}_{+}^{+\cdot}\hat{\psi}_{-}^{+\cdot}=\hat{\psi}_{+}^{+\cdot}\hat{\psi}_{-}^{\cdot}=\hat{\psi}_{+}^{\cdot}\hat{\psi}_{-}^{+\cdot}=0 \tag{1.4.13}$$

考虑上面的第一对算符，其T乘积为

$$T[\hat{\psi}_{+}(x)\hat{\psi}_{-}(y)]=\begin{cases}\hat{\psi}_{+}(x)\hat{\psi}_{-}(y), & t_x>t_y\\ \pm\hat{\psi}_{-}(y)\hat{\psi}_{+}(x), & t_y>t_x\end{cases} \tag{1.4.14}$$

第二行中的“+”相应于玻色统计，“—”相应于费密统计．但相互作用绘景中场算符是$C_k\mathrm{e}^{-i\varepsilon_k t}$形式的项的线性组合，因此不论对那种统计上式都可重写为

$$T[\hat{\psi}_{+}(x)\hat{\psi}_{-}(y)]=\pm\hat{\psi}_{-}(y)\hat{\psi}_{+}(x) \tag{1.4.15}$$

因为$\hat{\psi}_{-}$、$\hat{\psi}_{+}$在任何时间都是对易或反对易的．这个结论只对相互作用绘景才成立，这时算符的对易性质与Schrödinger绘景中的相同．由正规乘积的定义我们有

$$N[\hat{\psi}_{+}(x)\hat{\psi}_{-}(y)]=\pm\hat{\psi}_{-}(y)\hat{\psi}_{+}(x) \tag{1.4.16}$$

因此有

$$\hat{\psi}_{+}^{\cdot}(x)\hat{\psi}_{-}^{\cdot}(y)\equiv T[\hat{\psi}_{+}(x)\hat{\psi}_{-}(y)]-N[\hat{\psi}_{+}(x)\hat{\psi}_{-}(y)]=0 \tag{1.4.17}$$

同理可证(1.4.13)式中其它的收缩也等于零，因为其中所有成对的算符都是对易或反对的．方程(1.4.13)式表明，很多算符的成对收缩等于零．收缩不等于零的有以下的项：

$$\hat{\psi}_{+}(x)^{\cdot}\hat{\psi}_{+}^{+}(y)^{\cdot}=\begin{cases}\mathrm{i}G^0(x,y), & t_x>t_y\\ 0, & t_x<t_y\end{cases} \tag{1.4.18}$$

$$\hat{\psi}_{-}(x)^{\cdot}\hat{\psi}_{-}^{+}(y)^{\cdot}=\begin{cases}0, & t_x>t_y\\ \mathrm{i}G^0(x,y), & t_x<t_y\end{cases} \tag{1.4.19}$$

对费密子系统由(1.4.10)和(1.3.39)式可以证明以上结果．对非凝聚的玻色子系统也可证明相同的结果．注意到收缩是一个数

而不是算符，因此有

$$\langle\Phi_0|T(\hat{U}\hat{V})|\Phi_0\rangle=\langle\Phi_0|\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot}|\Phi_0\rangle+\langle\Phi_0|N(\hat{U}\hat{V})|\Phi_0\rangle$$

$$=\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot} \tag{1.4.20}$$

因为$\langle\Phi_0|N(\hat{U}\hat{V})|\Phi_0\rangle=0$. 由收缩运算的分配律可以证明

$$\hat{\psi}_\alpha(x)^{\cdot}\hat{\psi}^{+}_\beta(y)^{\cdot}=\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x,y) \tag{1.4.21}$$

4. 符号约定　我们引入符号规则. 若正规乘积中的场算符包括一个以上的收缩，则用一个点"·"表示一对算符的收缩，用两个点"··"表示另一对算符的收缩，依此类推. 重新排列算符次序可将收缩的两个算符排在一起，算符交换次序时引入因子$(-1)^P$，然后将收缩用格林函数代替. 因为这些收缩只是坐标的函数故可拿到正规乘积符号的外面，例如

$$N(\hat{A}^{\cdot}\hat{B}\hat{C}^{\cdot}D\cdots)=\pm N(\hat{A}^{\cdot}\hat{C}^{\cdot}\hat{B}D\cdots)=\pm\hat{A}^{\cdot}\hat{C}^{\cdot}N(\hat{B}\hat{D}\cdots)$$

下面证明 Wick 定理，先将定理写出

Wick 定理：编时乘积可以按照如下方式改写为一系列正规乘积之和：

$$T(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}Z)$$

$$=N(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})+N(\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}Z)$$

$$+N(\hat{U}^{\cdot}\hat{V}\hat{W}^{\cdot}\cdots\hat{X}\hat{Y}Z)+\cdots+N(\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot\cdot}\hat{W}^{\cdots}\cdots\hat{X}^{\cdots}\hat{Y}^{\cdot\cdot}Z^{\cdot})$$

$$=N(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})+N(\text{所有可能的成对收缩的项的和}) \tag{1.4.22}$$

上式的右方包括了一切有着不同的收缩算符对的项，任何一项中如果有一对等于零的收缩，这一项就等于零.

Wick 定理的基本思想是，考虑一个给定的时间顺序，然后将产生算符移到消灭算符的左边，当这个产生算符与交换位置的算符并不对易(或反对易)时则引入一个附加项，就是上面引入的收缩. 若产生算符已在消灭算符的左边则(1.4.22)式中相应的收缩等于零，但仍包含在 Wick 定理中. Wick 定理列举了将T乘积重

排为N乘积时引入的所有的附加项.

为了证明 Wick 定理，先证明下面的引理.

基本引理: 设 $N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y})$是一个正规乘积，$Z$ 是一个算符，Z的时间比$\hat{U},\hat{V},\cdots,\hat{X},\hat{Y}$ 的时间都早，则有

$$
\begin{aligned}
N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y})\hat{Z} = {} & N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}^{\cdot}\hat{Z}^{\cdot}) + N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}^{\cdot}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot}) \\
& + \cdots + N(\hat{U}^{\cdot}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot}) \\
& + N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) \qquad (1.4.23)
\end{aligned}
$$

即如果一个正规乘积从右边与一个时间较早的算符相乘，我们就得到一个正规乘积的和，它包含这个算符依次与正规乘积中所有算符的收缩和将此算符包含在正规乘积中的一项. 为证明引理先指出以下几点:

a. 如果 $\hat{Z}$ 是一个消灭算符，则所有的收缩等于零，因为$T(\hat{A}\hat{Z})=N(\hat{A}\hat{Z})$，上式只包含最后一项，定理成立.

b. 可以看出，(1.4.23)式对 $\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}$ 的任何重新排列都是不变的. 当(1.4.23)式的左右两边各项内的因子$\hat{U}$、$\hat{V}$、$\cdots\hat{X}$ 和 $\hat{Y}$ 按同一新顺序排列后两边各项都添了同一个因子$(-1)^P$，可以相互消去. 因此我们假定乘积 $\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}$ 已排成正则乘积的次序.

c. 如果 $\hat{Z}$ 是产生算符，则只要证明 $\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}$ 都是消灭算符的情况就行了. 如果还有产生算符的话，只要将所有的产生算符乘在(1.4.23)式各项的左端就行了. 因为产生算符与产生算符 $\hat{Z}$ 之间的收缩等于零. 假定 $\hat{Q}$ 是产生算符，$t_Q>t_z$，将 $\hat{Q}$ 左乘(1.4.23)式的两边，$\hat{Q}$ 显然可以放在N乘积中，再补上 $\hat{Q}$和 $\hat{Z}$ 收缩的项(等于零)就可得到(1.4.23)式的形式. 这样就可证明(1.4.23)式对$\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}$ 中包含产生算符的情况也成立. 因此只需证明当 $\hat{Z}$ 是产生算符而 $\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}$ 是消灭算符时引理成立就够了.

以下用归纳法证明基本引理. 当 $N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y})$只含一个因子 $\hat{Y}$ 时(1.4.23)式显然是成立的，

$$N(\hat{Y})\hat{Z}=T(\hat{Y}\hat{Z})=\hat{Y}^{\cdot}\hat{Z}^{\cdot}+N(\hat{Y}\hat{Z})$$

现在假定(1.4.23)式对 n 个算符是成立的，然后证明它对 $n+1$ 个算符也成立．用另一消灭算符 $\hat{D}$ 从左边乘(1.4.23)式各项，$\hat{D}$ 的时间比 $\hat{Z}$ 的时间较迟($t_D>t_z$)，则有

$$\begin{aligned}\hat{D}N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y})\hat{Z}&=N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y})\hat{Z}\\&=N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}^{\cdot}\hat{Z}^{\cdot})+N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}^{\cdot}\hat{Y}\hat{X}^{\cdot})\\&\quad+\cdots+N(D\hat{U}^{\cdot}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot})\\&\quad+\hat{D}N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\end{aligned}$$

因为 $\hat{U}$、$\hat{V}$、$\cdots\hat{X}$、$\hat{Y}$ 都是消灭算符，而 $\hat{Z}$ 与消灭算符的收缩是一个数，因此除去最后一项外 $\hat{D}$ 可放在正规乘积中．最后一项可以写为

$$\hat{D}N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})=N(\hat{D}^{\cdot}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot})+N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})$$

证明如下

$$\begin{aligned}\hat{D}N(\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})&=(-1)^{P}\hat{D}\hat{Z}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\\&=(-1)^{P}T(\hat{D}\hat{Z})\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\\&=(-1)^{P}\hat{D}^{\cdot}\hat{Z}^{\cdot}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\\&\quad+(-1)^{P+Q}N(ZD)\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\\&=[(-1)^{P}]^{2}\hat{D}^{\cdot}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot}\\&\quad+[(-1)^{P+Q}]^{2}N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\\&=N(\hat{D}^{\cdot}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot})+N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\end{aligned}$$

第二行中$(-1)^P$ 是由于将排在末尾的算符 $\hat{Z}$ 调到最前面时交换费密子算符而产生的因子．$\hat{Z}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}$ 已按正规乘积顺序排列，因而略去N乘积的符号．根据假设 $t_D>t_z$，$\hat{D}\hat{Z}$ 是已编好时的．第4行由收缩的定义得到，$(-1)^Q$是由交换$\hat{D}$和$\hat{Z}$引入的．第 4 行最后一项已按正规乘积次序排列，因为 $\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}$ 都是消灭算符．符号规则允许我们重新排列算符而得到最后的形式．这就证明了 $N(\hat{D}\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y})$中有 $n+1$ 个因子时(1.4.23) 式也是成立的，即证

明了(1.4.23)式在一般情况下都是正确的.

以上结果可以推广到包含场算符收缩的正规乘积，如在(1.4.23)式的两边乘以两个算符的收缩 $\hat{R}^{\cdot\cdot}\hat{S}^{\cdot\cdot}$，然后在两边交换算符的次序，交换中两边产生相同的因子$(-1)^P$，相互抵消. 因此基本引理可以推广为

$$
\begin{aligned}
N(\hat{U}\hat{V}^{\cdot\cdot}\cdots\hat{X}^{\cdot\cdot}\hat{Y})\hat{Z} &= N(\hat{U}\hat{V}^{\cdot\cdot}\cdots\hat{X}^{\cdot\cdot}\hat{Y}^{\cdot}\hat{Z}^{\cdot})+\cdots \\
&\quad +N(\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot\cdot}\cdots\hat{X}^{\cdot\cdot}\hat{Y}\hat{Z}^{\cdot})+N(\hat{U}\hat{V}^{\cdot\cdot}\cdots\hat{X}^{\cdot\cdot}\hat{Y}\hat{Z})
\end{aligned}
\tag{1.4.24}
$$

在公式(1.4.23)式、(1.4.24)式的基础上，Wick 证明了定理(1.4.22)式.

Wick 定理用归纳法证明. 对两个算符，定理显然是成立的. 根据收缩的定义

$$
T(\hat{U}\hat{V})=\hat{N}(\hat{U}\hat{V})+\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot}
$$

假定(1.4.22)式在 T 乘积中有 n 个因子时是正确的，然后在 (1.4.22)式各项的右端乘一个算符 $\hat{\Omega}$，假定 $\hat{\Omega}$ 的时间比其它因子的时间都早. 则有

$$
\begin{aligned}
& T(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\hat{\Omega} \\
&= T(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\hat{\Omega}) \\
&= N(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\hat{\Omega}+N(\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})\Omega+\cdots \\
&\quad +N(\hat{U}^{\cdot}\hat{V}^{\cdot\cdot}\hat{W}^{\cdot\cdot\cdot}\cdots\hat{X}^{\cdot\cdot\cdot}\hat{Y}^{\cdot\cdot}\hat{Z}^{\cdot})\Omega \\
&= N(\hat{U}\hat{V}\hat{W}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}\hat{\Omega})+N\ (\text{所有可能的成对收缩的和})
\end{aligned}
\tag{1.4.25}
$$

因为 $\hat{\Omega}$ 的时间比第一行 T 乘积各算符的时间都早，因而可以包含在 T 乘积中. 在右边我们用基本引理 (1.4.23)和公式 (1.4.24)将算符 $\hat{\Omega}$ 放入 N 乘积中. 这样就证明了(1.4.22) 在乘积有 $n+1$ 个因子时也是正确的. 标志$\hat{\Omega}$的时间并没有限制 (1.4.22)式的普遍性. 因为将该式中各项的因子按同一个新的次序重新排列，每项都增加了一个因子$(-1)^P$，可以相互消去而(1.4.22)式仍然成

立. 这就证明了不论乘积中有多少因子,(1.4.22)式总是成立的.

以上证明中假定了 $\hat{U}\hat{V}\cdots\hat{X}\hat{Y}$ 等是产生算符或消灭算符（如 C_k^+、C_k 等）,但 T 乘积和正规乘积都服从分配律，因而 Wick 定理对场算符(如 ψ、ψ^+等)也是成立的.

Wick 定理是一个算符等式,它对任何态的矩阵元都成立. 对基态 $|\Phi_0\rangle$ 求平均时，所有包含未收缩算符的正规乘积的平均值等于零,因此有

$$
\begin{aligned}
&\langle\Phi_0|T[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\cdots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}]|\Phi_0\rangle \\
&\quad=\langle\Phi_0|T[\hat{A}\hat{B}]|\Phi_0\rangle\langle\Phi_0|T[\hat{C}\hat{D}]|\Phi_0\rangle\cdots\langle\Phi_0|T[\hat{Y}\hat{Z}]|\Phi_0\rangle \\
&\quad\pm\langle\Phi_0|T[\hat{A}\hat{C}]|\Phi_0\rangle\langle\Phi_0|T[\hat{B}\hat{D}]|\Phi_0\rangle\cdots\langle\Phi_0|T[\hat{Y}\hat{Z}]|\Phi_0\rangle \\
&\quad+\cdots
\end{aligned}
\tag{1.4.26}
$$

这样，左面的平均值就分成了各种可能的成对编时算符对基态平均值的乘积之和. 每一项前面的符号由费密子算符置换次数的奇偶决定，若置换的次数为 P 则该项前面的因子为 $(-1)^P$. 由此可以得出结论:任何数目场算符 T 乘积对 $|\Phi_0\rangle$ 的平均值都可以表示为自由粒子格林函数乘积之和.

§1.5 相互作用绘景中格林函数的级数解

用 Wick 定理可求出格林函数微扰展开中的各项. 因为 $T=0K$ 时玻色系统有凝聚现象，本节只讨论有二体相互作用的费密子系统. 将哈密顿量写为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$$

$\hat{H}_0$ 是系统的动能, $\hat{H}_1$ 代表粒子之间的二体相互作用. 在 Schrödinger 绘景中 $\hat{H}$ 的表示式为(1.3.18) 式. $\hat{H}_0$ 的基态 $|\Phi_0\rangle$ 是自由费密海，即半径为 k_F 的填满的费密球. 为了应用 Wick定理计算微扰级数，在相互作用绘景中将 ψ^+、ψ 分解为对基态 $|\Phi_0\rangle$ 的产生和消灭算符,因而对(1.4.22)式那样的项求平均值 $\langle\Phi_0|\cdots$

$|\Phi_0\rangle$ 时只有完全成对收缩的项才不等于零. 而这些收缩正好是零级格林函数 G^0，因而 G 就展开为 G^0 和相互作用势 $\dot{U}$ 的函数.

前面的讨论假定系统的粒子数 N 是确定的，这在实际计算中很不方便. 例如计算粒子数就可能导致不正确的结果. 已知粒子数 N 可表示为

$$N=2\sum_{\boldsymbol{k}}(-\mathrm{i})\lim_{t\to 0^-}G(\boldsymbol{k}t)$$

$$=-2\mathrm{i}\lim_{t\to 0^-}V\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}G(\boldsymbol{k},\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$

假定系统有 N_0 个粒子. 设想我们对 G 中某类图形作部分求和以得到 G 的一种近似，然后代入上式看是否满足 $N=N_0$. 实际上，近似的 G 是 G^0 的函数，G^0 依赖于 k_{F}，而 k_{F} 和 N_0 的关系是

$$N_0=2\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}}1=2V\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}=\frac{k_{\mathrm{F}}^3}{3\pi^2}V$$

$$k_{\mathrm{F}}=\left(3\pi^2\frac{N_0}{V}\right)^{1/3}$$

因此 N 将是 N_0 的函数. V 是系统的体积. 但是 G 只取了近似，所以不能保证 N 一定等于 N_0.

避免这个困难的一个方法是变换到 $T=0\mathrm{K}$ 时的巨正则系综. 巨正则系综不是粒子数固定的孤立系，它与外界可以交换热量和粒子，粒子数 N 本身是一个变量而系统的化学势 μ 是确定的. 在计算的最后取总粒子数等于 N_0 就可定出 μ. 对巨正则系综，哈密顿量是

$$\hat{H}'=\hat{H}-\mu\hat{N}=\hat{H}_0'+\hat{H}_1$$

$$\hat{H}_0'=\sum_{\boldsymbol{k}}(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu)C_{\boldsymbol{k}}^{+}C_{\boldsymbol{k}}$$

上式中 $\hat{N}$ 是总粒子数算符.

算符由 Schrödinger 绘景到 Heisenberg 绘景的变换公式现

在是

$$\hat{\psi}_{\mathrm{H}\mu}(\boldsymbol{x}t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\hat{H}-\mu\hat{N})t}\ \hat{\psi}_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat{H}-\mu\hat{N})t}$$

由于 $\hat{H}$ 与 $\hat{N}$ 对易，此式可写为

$$\hat{\psi}_{\mathrm{H}\mu}(\boldsymbol{x}t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\hat{N}t}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\ \hat{\psi}_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu\hat{N}t}$$

$$=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\hat{N}t}\ \hat{\psi}_{\mathrm{H}N}(\boldsymbol{x}t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu\hat{N}t}$$

式中角标 μ 和 N 分别标明以 μ 或 N 为变量. 注意到算符 ψ 使粒子数减少一个，就得到

$$\hat{\psi}_{\mathrm{H}\mu}(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu t}\ \hat{\psi}_{\mathrm{H}N}(x)$$

同理对 $\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\mu}(x)$ 有

$$\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\mu}(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t}\ \hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}N}(x)$$

格林函数的变换为

$$G_{\mu}(x,x')=G_{N}(x,x')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu(t-t')}$$

由此可见，变换到动量空间时只需作变换

$$\omega_{(N)}\longrightarrow\omega_{(\mu)}+\mu$$

则前面的全部结论对 G_{μ} 都成立.

$\hat{H}'_0$ 基态的决定是选取粒子数和能级的填充方式使能量最小. 容易看出，这表示所有能级都被填满，一直填到 $\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}=\mu$，即 $k^{\mu}_{\mathrm{F}}=\sqrt{2m\mu}$. 相应的粒子数为 $\dfrac{N}{V}=(2m\mu)^{3/2}/3\pi^2$. $\hat{H}'_0$ 的单粒子格林函数是

$$G^0_{\mu}(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{\omega-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)+\mathrm{i}\delta^{\mu}_{\boldsymbol{k}}}$$
$$\delta^{\mu}_{\boldsymbol{k}}=\begin{cases}+\delta, & \varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}>\mu\\ -\delta, & \varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}<\mu\end{cases}\tag{1.5.1}$$

费曼图的其它规则都不改变，只是以 G^0_{μ} 代替 G^0 即可. 这样，我们算出的 G(近似)是 μ 的函数，由 G 算出的 N 也是 μ 的函数，然后用下式决定 μ

$$N(\mu)=N_0$$

这样就可保证,由近似的 G 也可得到正确的粒子数.

由于实际计算中应用函数 G_μ 更为方便,本节和以后的讨论都是对 G_μ 而言的,但仍用 G 表示. G_μ^0 仍记为 G^0, G_μ^0 分母中的 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu$ 仍记为 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0$,这点请读者注意.

格林函数的级数展开可以在坐标空间进行也可以在动量空间进行.我们先讨论坐标空间的图解法.

一、坐标空间的费曼图

作为应用 Wick 定理的例子,先计算(1.4.5)式中的一级项.将这一项用 Wick 定理展开,只有那些算符已完全成对收缩的项对 $|\Phi_0\rangle$ 的平均值才不等于零. Wick 定理要求对所有可能的成对收缩的项求和,而只有 ψ 和 ψ^+ 之间的收缩才不等于零.由此可将(1.4.5)的一级项写为

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}G'_{\alpha\beta}(x,y)=&\frac{-\mathrm{i}}{\langle s\rangle}\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_1'U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\\
&\times\langle\Phi_0|T[\hat{\psi}_\lambda^+(x_1)\hat{\psi}_\mu^+(x_1')\hat{\psi}_{\mu'}(x_1')\hat{\psi}_{\lambda'}(x_1)\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(y)]|\Phi_0\rangle\\
=&\frac{-\mathrm{i}}{\langle s\rangle}\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_1'U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\\
&\times\{\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,y)[\mathrm{i}G^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')\mathrm{i}G^0_{\lambda'\lambda}(x_1,x_1)-\mathrm{i}G^0_{\mu'\lambda}(x_1',x_1)\mathrm{i}G'_{\alpha\mu}\\
&(x_1,x_1')]+\mathrm{i}G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)[\mathrm{i}G^0_{\lambda'\mu}(x_1,x_1')\mathrm{i}G^0_{\mu'\beta}(x_1',y)-\mathrm{i}G^0_{\lambda'\beta}\\
&(x_1,y)\mathrm{i}G^0_{\mu'\mu}(x_1',x_1')]+\mathrm{i}G^0_{\alpha\mu}(x,x_1')[\mathrm{i}G^0_{\mu'\lambda}(x_1',x_1)\mathrm{i}G^0_{\lambda'\beta}(x_1,\\
&y)-\mathrm{i}G^0_{\mu'\beta}(x'_1,y)\mathrm{i}G^0_{\lambda'\lambda}(x_1,x_1)]\}
\end{aligned}\tag{1.5.2}$$

现在将每一项用一个图形表示. $G^0(x,y)$ 由一带箭头的线表示,箭头从 G^0 的第二个变量到第一个变量.势能由一条波纹线代表如图 1.5 所示. (1.5.2) 中各项的图形示于图 1.6 中.这种形式的图形展开是 Feynman 在量子电动力学理论中首先提出来的,称为

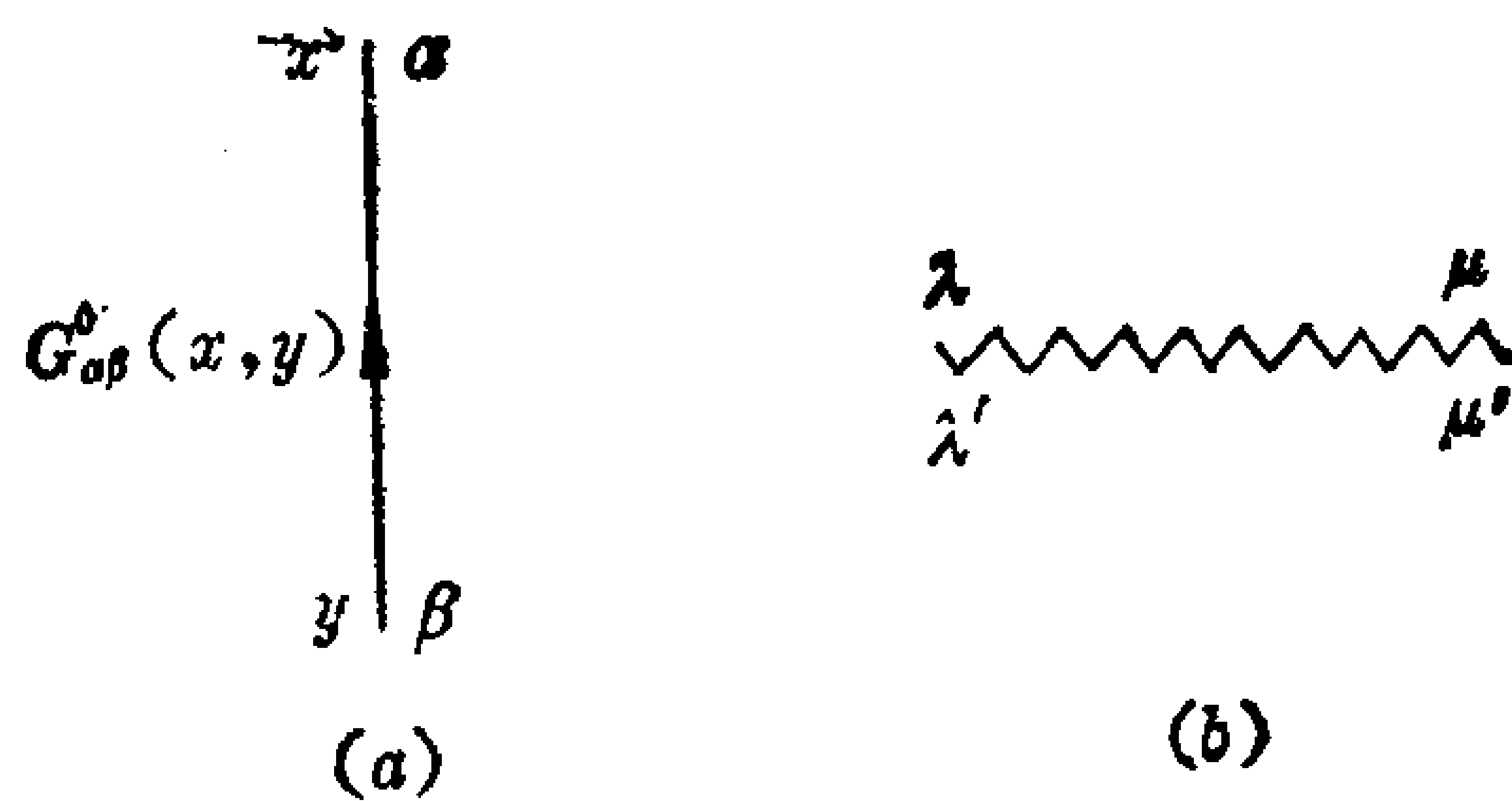


图 1.5

费曼图.

格林函数的解析表达式和相应的费曼图有下面一些重要的性质.

(1) 图 1.6 中的 a、b、d 和 f 中 G^0 函数的两个变量有相同的

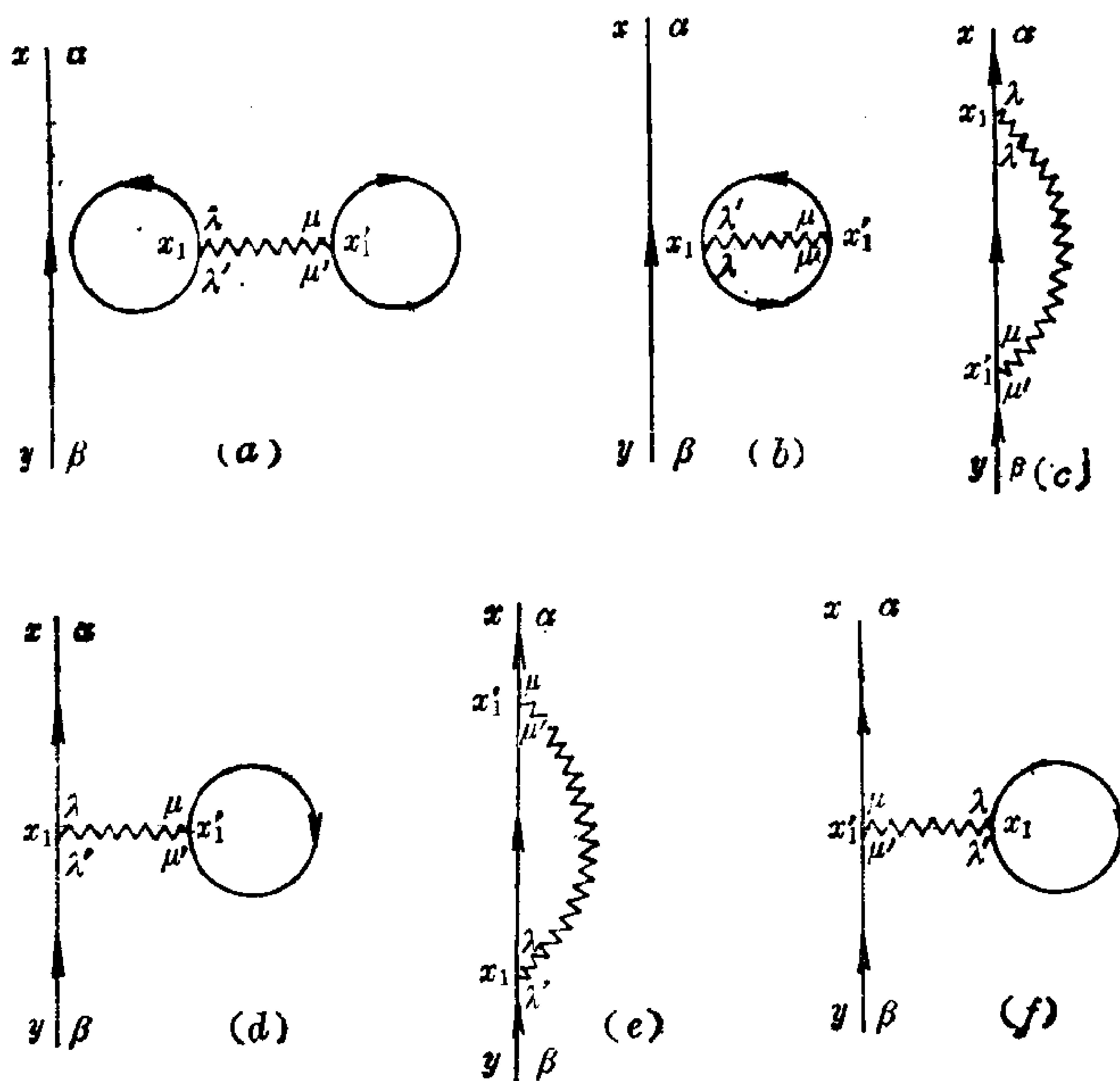


图 1.6

时间．G^0 是两个算符的编时乘积，对相等的时间编时乘积的意义不明确．这些 G^0 是由同一个 $\hat{H}_1$ 中两个算符的收缩得到的．它们在 $\hat{H}_1$ 中出现的次序为 $\hat{\psi}^+\hat{\psi}$．因此，两个时间变量相等时格林函数解释为

$$iG^0_{\alpha\beta}(x,x) = \lim_{t'\to t^+} \langle \Phi_0 | T[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}t)\hat{\psi}^+_\beta(\boldsymbol{x}t')] | \Phi_0 \rangle \quad (1.5.3)$$

(2) 图 1.6 中 a 和 b 是不相连图，即图中有些部分没有用实线或波纹线与其它部分连接起来．将表达式和图形比较可以看出，这些项中 $G^0_{\alpha\beta}(x,y)$ 的变量和 $\hat{H}_1$ 中的变量是分开的，可以写为两个因子的乘积．一个因子是 $G^0_{\alpha\beta}(x,y)$，积分代表另一个因子．高级项也有类似的情况．所以G的费曼图可以分为两类：相连图形和不相连图形．相连图指一切点都以某种方式与外端点（即 x、y）连结的图．一般情况下，微扰论级数的某一项凡是$\hat{\psi}_\alpha(x)$和$\hat{H}_1(t_1)$中的 ψ^+收缩而 $\hat{H}_1(t_1)$中的 ψ 又与 $\hat{H}_1(t_2)$中的 ψ^+收缩，依此类推而不空过任何一个 $\hat{H}_1$，最后与 $\hat{\psi}^+_\beta(y)$收缩，得到的就是相连图．所有其它图形都有一个或几个 $\hat{H}_1$ 中的算符未与 $\hat{\psi}_\alpha(x)$、$\hat{\psi}^+_\beta(y)$ 或与之相连的 $\hat{H}_1$ 中的场算符收缩，这些就是不相连图．现在

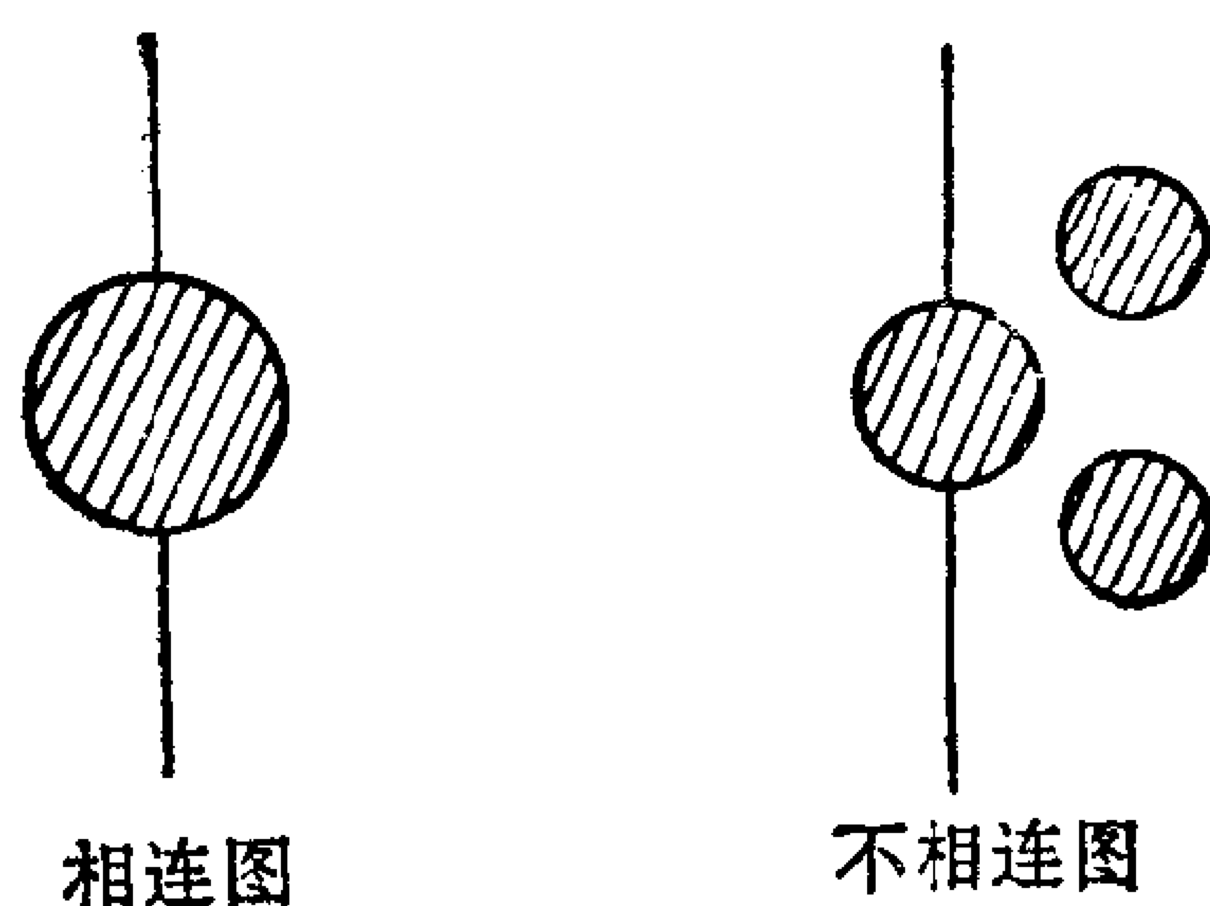


图 1.7

讨论某个不相连图，它显然由两个因子组成．第一个因子包括所有与 $\hat{\psi}_\alpha(x)$、$\hat{\psi}^+_\beta(y)$ 发生联系的 $\hat{H}_1$，第二个因子描写其它部分．

故可写为

$$-\mathrm{i}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int\cdots\int \mathrm{d}t_1\cdots\mathrm{d}t_m\langle\Phi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(y)\hat{H}_1(t_1)$$

$$\cdots\hat{H}(t_m)]|\Phi_0\rangle_c\times\int\cdots\int\mathrm{d}t_{m+1}\cdots\mathrm{d}t_n\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_{m+1})$$

$$\cdots\hat{H}_1(t_n)]|\Phi_0\rangle$$

式中的标记 c 表示相连图，第二个因子表示不相连部分. 不难看出，有些图形的贡献完全相同. 其实只要改变收缩的次序，使得各 $\hat{H}_1$ 重新分配于两个括弧 $\langle\cdots\rangle_c$ 和 $\langle\cdots\rangle$ 之间，就可得到贡献相同的图. 这样作等于变换积分变量并不改变修正项的数项. 这种图形的数目等于将 n 个算符 $\hat{H}_1$ 分成含 m 个和 $(n-m)$ 个算符的两组的组合数，即 $\dfrac{n!}{m!(n-m)!}$ 所有这种图形的总贡献是

$$(-\mathrm{i})\frac{(-\mathrm{i})^m}{m!}\int\cdots\int\mathrm{d}t_1\cdots\mathrm{d}t_m\langle\Phi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(y)\hat{H}_1(t_1)$$

$$\cdots\hat{H}_1(t_m)]|\Phi_0\rangle_c\times\frac{(-\mathrm{i})^{n-m}}{(n-m)!}\int\cdots\int\mathrm{d}t_{m+1}$$

$$\cdots\mathrm{d}t_n\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_{m+1})\cdots\hat{H}_1(t_n)]|\Phi_0\rangle$$

将包含一定相连部分和任意不相连部分的各级图形的贡献加起来，结果是

$$(-\mathrm{i})\frac{(-\mathrm{i})^m}{m!}\int\cdots\int\mathrm{d}t_1\cdots\mathrm{d}t_m\langle\Phi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\psi^+_\beta(y)\hat{H}_1(t_1)$$

$$\cdots\hat{H}_1(t_m)]|\Phi_0\rangle_c\times\Big\{1-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_{m+1}\langle\Phi_0|T\hat{H}_1(t_{m+1})|\Phi_0\rangle$$

$$-\frac{1}{2}\iint\mathrm{d}t_{m+1}\mathrm{d}t_{m+2}\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_{m+1})\hat{H}_1(t_{m+2})]|\Phi_0\rangle+\cdots$$

$$+\frac{(-\mathrm{i})^k}{k!}\int\cdots\int\mathrm{d}t_m\cdots\mathrm{d}t_{m+k}\langle\Phi_0|T[\hat{H}_1(t_{m+1})$$

$$\cdots\hat{H}_1(t_{m+k})]|\Phi_0\rangle+\cdots\Big\}$$

若将 $\langle\Phi_0|S(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle$ 按 $\hat{H}_1(t)$ 的幂展开，恰好是上式花括弧中的级数. 由此得到

$$\langle\Psi_0|T[\hat{\psi}_{H\alpha}(x)\hat{\psi}^+_{H\beta}(y)]|\Psi_0\rangle$$
$$=\langle\Phi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(y)S(\infty,-\infty)]|\Phi_0\rangle_c\langle\Phi_0|S(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle$$

式中的 $\langle\Phi_0|S(\infty,\ -\infty)|\Phi_0\rangle$ 可与（1. 4. 5）式分母中的 $\langle\Phi_0|S|\Phi_0\rangle$ 抵消．这样我们就得到

$$G_{\alpha\beta}(x,y)=-\mathrm{i}\langle\Phi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(y)S(\infty,-\infty)]|\Phi_0\rangle_c \quad (1.5.4)$$

这对于任意多个场算符的编时乘积都成立．它表明，我们可以省去(1.4.5)式中的分母，同时只考虑相连图的贡献．

(3) 相似图形的贡献是相等的．相似图形指仅靠将 $\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_m)$ 的时间变量 $t_1\cdots t_m$ 置换而得到的不同图形，这些图又称作是拓朴等价的．图 1.8 中的两个图就是相似图形．这些图形对 G 有相等的贡献，因为它们的差别仅仅是积分变量的标法不同．$\hat{H}_1$ 包含偶数个费密子算符，因此可以在 T 乘积下移动而不出现(−1)

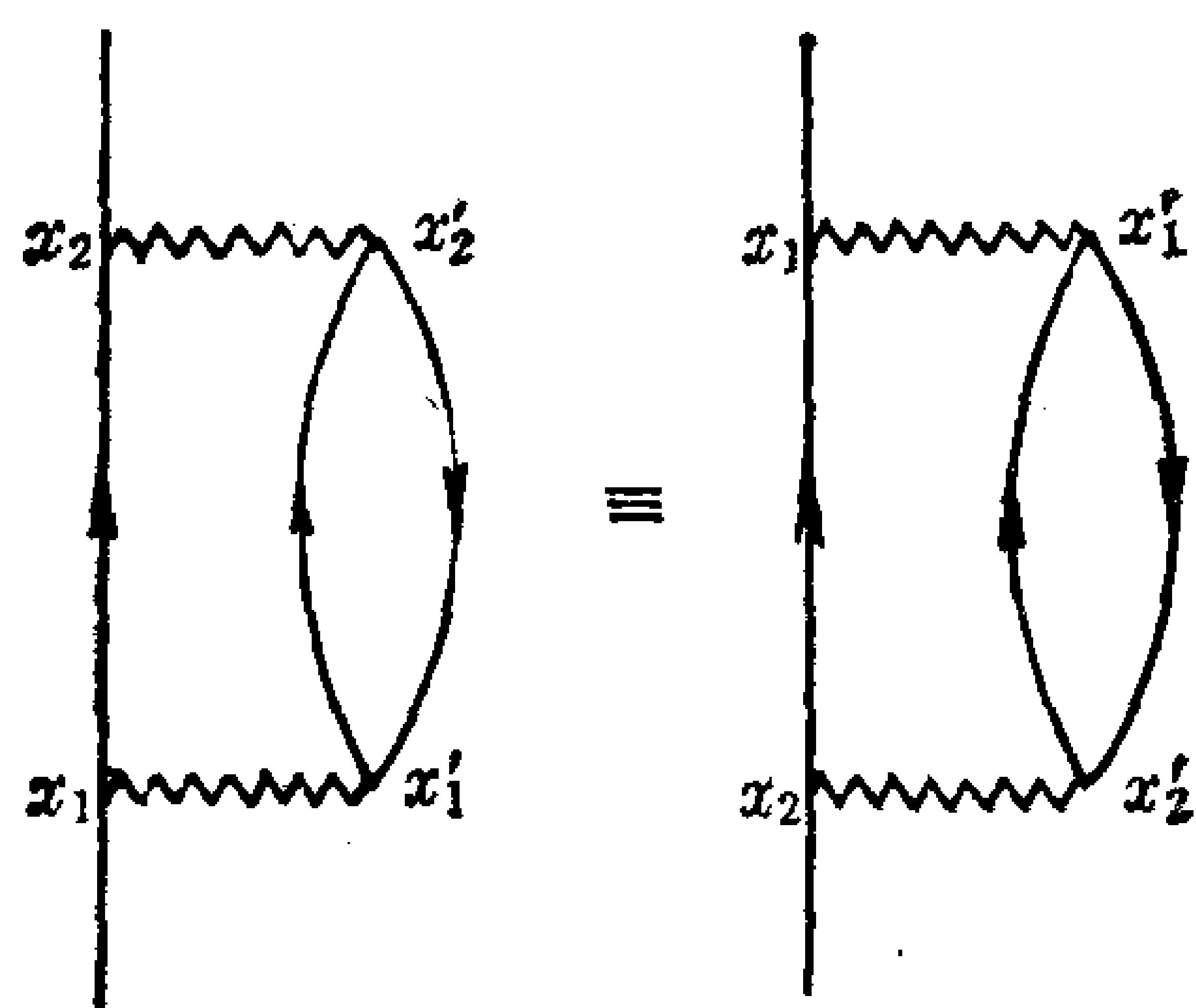


图 1.8　相连图中 $\hat{H}_1$ 的置换

因子．对 m 级有 $m!$ 个可能的置换，它们对 G 的贡献都是相同的，故可抵消前面的因子$\frac{1}{m!}$．这样我们就可只计算拓朴不等价图，同时略去前去的因子$\frac{1}{m!}$．这个结果只对相连图是正确的．

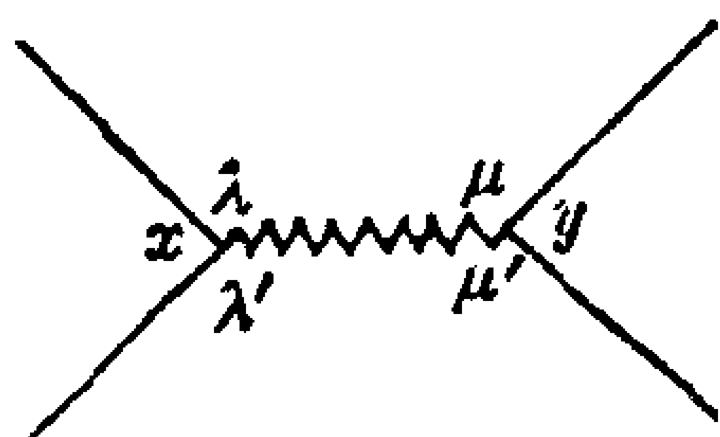
(4) 一级图(图 1.6)中 c 和 e 以及 d 和 f 的贡献是相同的．

它们的差别仅在于交换变量 x_1、x_1'，而势能对这种交换是对称的．因此只需保留其中一个而消去因子$\frac{1}{2}$.

这样我们就得到计算单粒子格林函数第 n 级修正项的规则如下：

a．画出有 n 条相互作用U线和 $2n+1$ 条定向 G^0 线的所有拓朴不等价图．

b．用 4 维时空点 $x_i(\boldsymbol{x}_i, t_i)$标出每个顶角如下图所示．



c．每条实线代表 $G^0_{\alpha\beta}(x,y)$，方向从 y 到 x.

d．每条波纹线代表相互作用

$$U(x,y)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}=V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})_{\lambda\lambda',\mu\mu'}\delta(t_x-t_y)$$

e．对所有内部空间和时间变量积分，对内自旋变量求和．

f．若图中有 f 个封闭的费密环，则表达式乘以因子$(-1)^F$．说明如下：一个封闭环内场算符的收缩可排列如下：

$$[\hat{\psi}^+(1)^{\cdot}\psi(1)^{\cdot\cdot}][\hat{\psi}^+(2)^{\cdot\cdot}\hat{\psi}(2)^{\cdot\cdot\cdot}]\cdots[\hat{\psi}(N)^{\cdot}]$$

这种排列并不改变表达式的符号．现在需要一个奇数的位置交换将最后的场算符移到左边，因此产生一个负号．

g．n 级项包含因子$(-\mathrm{i})^n$，$(2n+1)$ 个收缩贡献附加因子i^{2n+1}，所以 n 级费曼图表达式的前面有因子$(\mathrm{i})^n$.

h．时间变量相等的格林函数解释为

$$G^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}t,\boldsymbol{x}t^+)$$

费曼图的规则与相互作用哈密顿量 $\hat{H}_1$ 的形式有关．以上规则只适用于有二体相互作用的全同费密子系统．

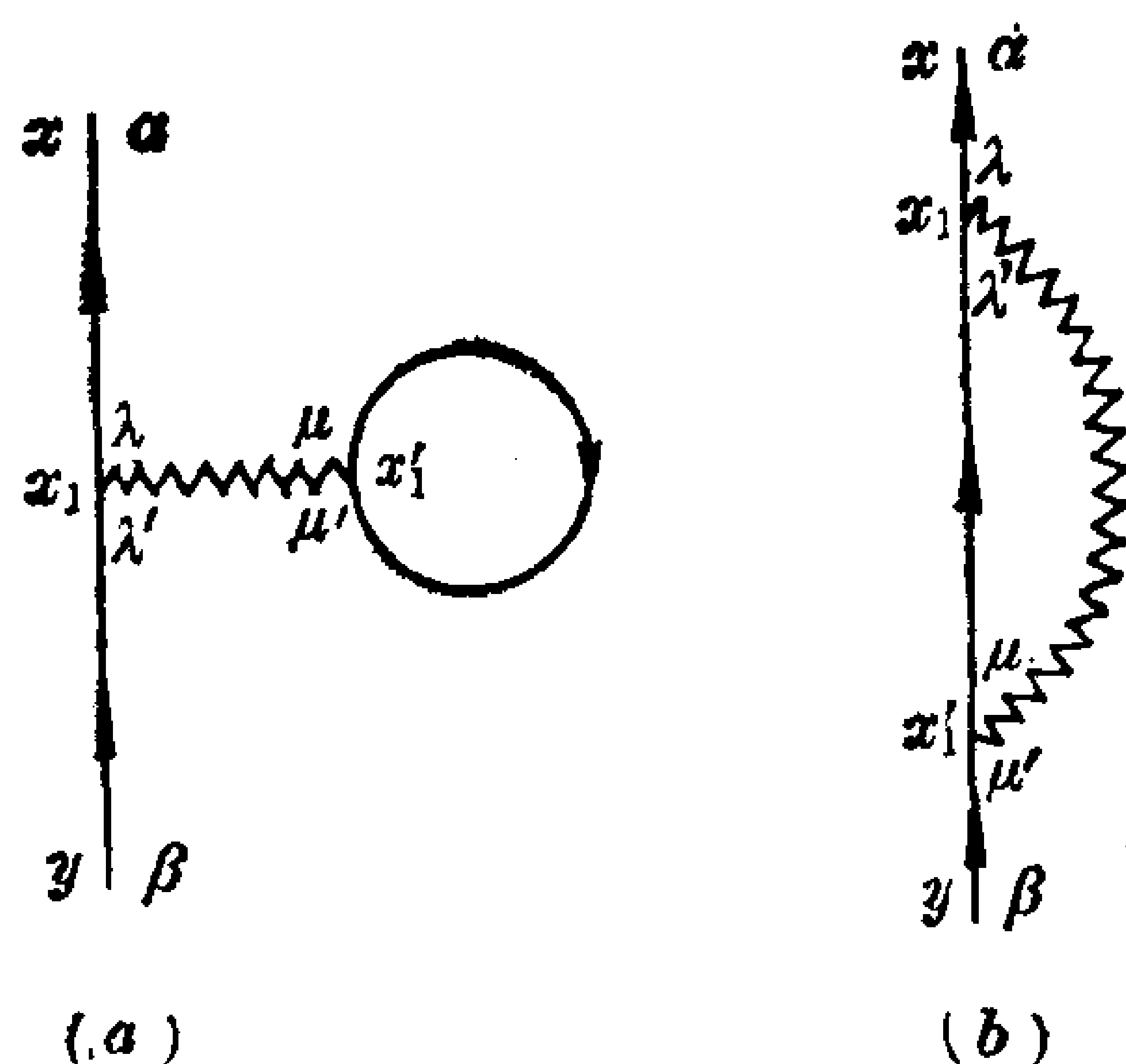


图 1.9 $G_{\alpha\beta}(x,y)$的一级费曼图

根据以上规则可以写出任一级费曼图的表达式. 例如图 1.9 表示一级费曼图的贡献,其表达式为(1.5.5).

$$
\begin{aligned}
& G_{\alpha\beta}^{1}(x,y) \\
& = \mathrm{i}\int \mathrm{d}^4 x_1 \mathrm{d}^4 x_1' \Big\{ (-1) G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1) U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'} G^0_{\lambda'\beta}(x_1,y) \\
& G^0_{\mu\mu'}(x_1'x_1') + G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1) U(x_1,x_1')_{\lambda\lambda',\mu\mu'} G^0_{\lambda'\mu}(x_1,x_1') G^0_{\mu'\beta}(x_1',y) \Big\}
\end{aligned} \tag{1.5.5}
$$

其中重复的自旋坐标表示求和. 二级费曼图要复杂的多, 共有 10 个拓扑不等价的相连图.

二、动量空间的图解法

上述坐标空间的图解法使我们可以把微扰论级数的任意项写为积分形式. 由于 $G^0(xt)$ 是时间变量的不连续函数, 计算 G 的修正项时要把对时间的积分分成许多区间, n 增加时区间的数目急剧增加, 使积分计算十分困难. 对均匀而不依赖于时间的系统把有关的量变换到动量空间将使图形的计算大大简化.

对均匀的各向同性系统,G 函数可以写为 $G_{\alpha\beta}(x-y)$ 的形式.

其傅氏变换为

$$G_{\alpha\beta}(x,y)=\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{ik\cdot(x-y)}\ G_{\alpha\beta}(k) \tag{1.5.6}$$

上式用了四维表示

$$d^4k=d^3kd\omega,\ k\cdot x=\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t$$

假定相互作用只依赖于坐标差，$U(x,x')=V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\delta(t-t')$，势的傅氏变换为

$$U(x,x')_{\alpha\alpha',\beta\beta'}=\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{ik\cdot(x-x')}U(k)_{\alpha\alpha',\beta\beta'} \tag{1.5.7}$$

其中

$$\begin{aligned}U(k)_{\alpha\alpha',\beta\beta'}&=\int d^3x\,dt\,e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}V(\boldsymbol{x})_{\alpha\alpha',\beta\beta'}\delta(t)\\&=\int d^3xe^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}V(\boldsymbol{x})_{\alpha\alpha',\beta\beta'}=V(\boldsymbol{k})_{\alpha\alpha',\beta\beta'}\end{aligned} \tag{1.5.8}$$

是粒子间势的傅氏变换. 作为例子，考虑将图 1-9b 的表达式变换到动量空间.

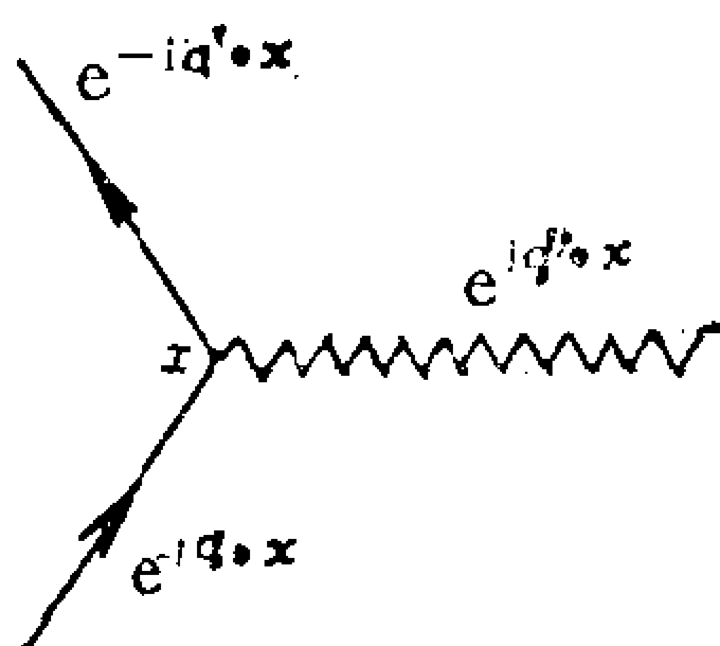
$$\begin{aligned}&G^{ib}_{\beta\alpha}(x,y)\\&=i\int d^4x_1d^4x_1'G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)U(x_1,x_1')_{\alpha\alpha',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\mu}(x_1,x_1')G^0_{\mu'\beta}(x_1',y)\\&=i\int d^4x_1d^4x_1'\int\frac{d^4kd^4k_1d^4k_2d^4q}{(2\pi)^{16}}G^0_{\alpha\lambda}(k)U(q)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\mu}(k_1)G^0_{\mu'\beta}(k_2)\\&\times e^{ik\cdot(x-x_1)+iq\cdot(x_1-x_1')+ik_1(x_1-x_1')+ik_2\cdot(x_1'-y)}\\&=i\int\frac{d^4kd^4k_1d^4k_2d^4q}{(2\pi)^{16}}(2\pi)^4\delta(-k+q+k_1)(2\pi)^4\delta(-q-k_1+k_2)\\&\times e^{ikx-ik_2y}G^0_{\alpha\lambda}(k)U(q)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\mu}(k_1)G^0_{\mu'\beta}(k_2)\\&=\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}e^{ik(x-y)}[iG^0_{\alpha\lambda}(k)\int\frac{d^4k_1}{(2\pi)^4}U(k-k_1)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}G^0_{\lambda'\mu}(k_1)G^0_{\mu'\beta}(k)]\end{aligned} \tag{1.5.9}$$

上式积分中用了下面的关系

$$\delta^4(k)=\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4x e^{ikx} \tag{1.5.10}$$

(1.5.9)式已变为所需要的形式. 与(1.5.6)式比较可以看出，方括弧中的表达式就是 $G^{1b}_{\alpha\beta}(k)=G^{1b}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)$.

从以上计算可以看出，在每个顶点四维动量是守恒的. 这点可进一步说明如下. 考虑一个内顶角如下图所示. 根据傅氏变换的定义，可以规定势 $U(x-x')$ 的方向为 $x'\to x$. 势本身没有确定的



方向，它的方向的选取是任意的，这种选取只保证在相互作用线的两端有前后一贯的物理解释. 坐标 x 现在只出现在平面波的指数中，入射线带有因子 e^{iqx}，出射线带有因子 e^{-iqx}，对 x 的积分给出

$$\int d^4x e^{i(q-q'+q'')x}=(2\pi)^4\delta(q-q'+q'')$$

即在每个顶角能量和动量守恒.

这实际上是一个普遍的方法，可用于任意 n 级微扰项. 由此类推可得到动量空间中计算 n 级贡献的规则如下:

a. 画出有 n 条相互作用线和 $2n+1$ 条粒子线的所有拓扑不等价图.

b. 每条线带有一个四维动量，在每个顶点四维动量守恒.

c. 每个格林函数相应于因子

$$G^0_{\alpha\beta}(k)=\delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\theta(|\boldsymbol{k}|-k_F)}{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+i\delta}+\frac{\theta(k_F-|\boldsymbol{k}|)}{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-i\delta}\right]$$

根据本节开始的讨论及 (1. 5. 1) 式，$\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}$ 应理解为 $\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu$，$k_F=\sqrt{2m\mu}$. 若无特别说明，对本书以后的类似公式也应这样

理解.

d. 每条相互作用线相应于因子

$$U(q)_{\lambda\lambda',\mu\mu'}=V(\boldsymbol{q})_{\lambda\lambda',\mu\mu'}$$

e. 对 n 个独立的内(四维)动量积分,对内自旋变量求和.

f. 乘以因子$(\mathrm{i})^n(2\pi)^{-4n}(-1)^{\mathrm{F}}$. F 为封闭费密环的数目.

g. 形成封闭环的单粒子线或两端与同一相互作用线连结的单粒子线应解释为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}G^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)$, $\eta\to 0^+$.

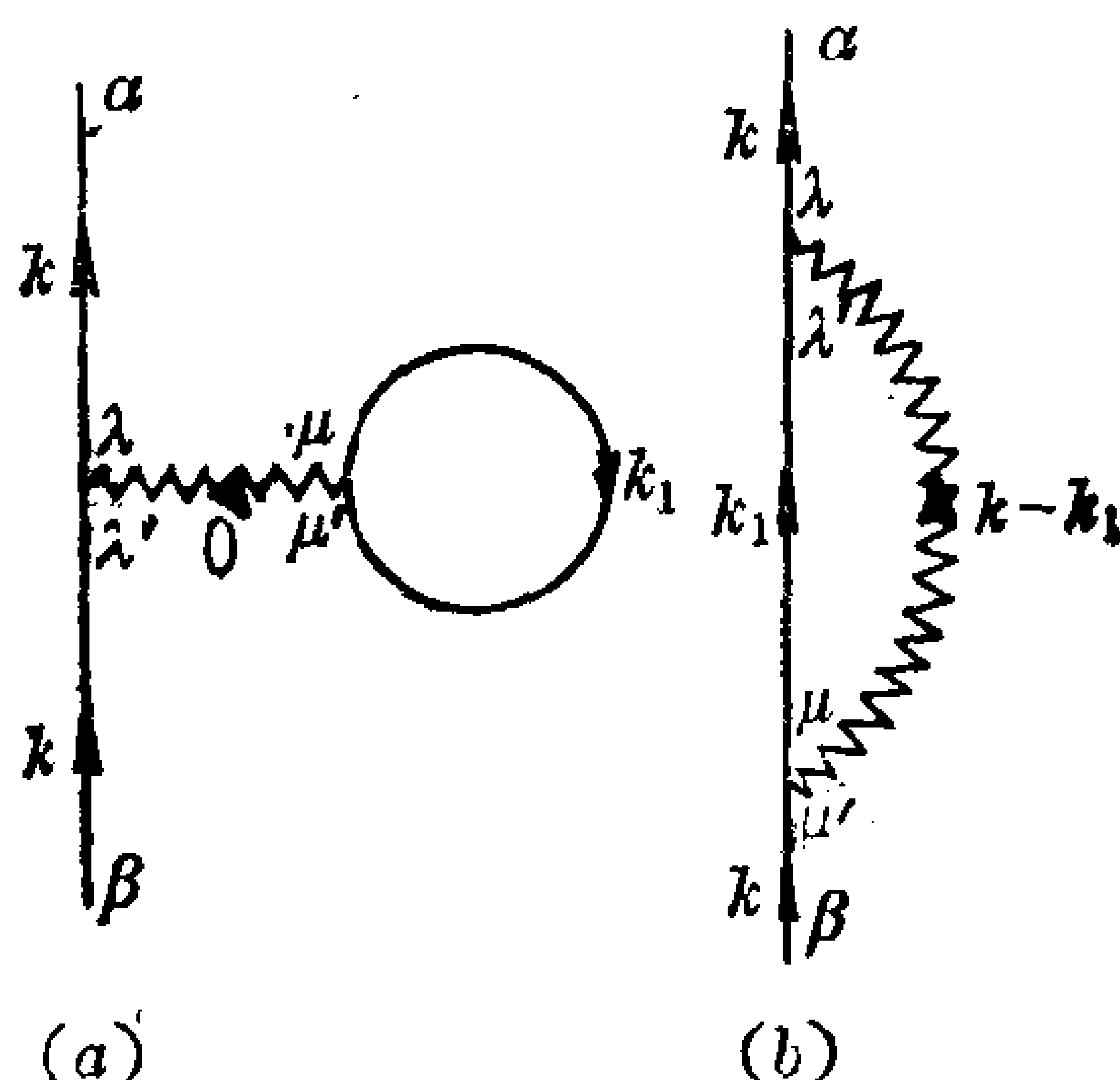


图 1.10 $G_{\alpha\beta}(k)$的一级费曼图

作为例子, 计算图 1.10 所示一级贡献 $G^1_{\alpha\beta}(k)$ 的表达式, 结果是

$$G^1_{\alpha\beta}(k)=\mathrm{i}G^0(k)\int\frac{\mathrm{d}^4k_1}{(2\pi)^4}\Big[-U(O)_{\alpha\beta,\mu\mu}G^0(k_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1\eta}$$
$$+U(k-k_1)_{\alpha\mu,\mu\beta}G^0(k_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1\eta}\Big]G^0(k) \tag{1.5.11}$$

因为在每个顶角都要求四维动量守恒, 所以图 1.10(*a*) 中相互作用线的四维动量等于零. (1.5.11)中自旋求和已经化简, 并用了下面的记号

$$\begin{aligned}U(0)&\equiv U(k=0)\\ V(0)&\equiv V(\boldsymbol{k}=0)\end{aligned} \tag{1.5.12}$$

图 1.10 的拓朴结构与坐标空间相应的图 1.9 完全相同，但图中的标记与物理解释并不相同. 图 1.10(a) 表示动量为 k 的粒子在传播过程中受到费密海中的粒子的散射. 图 1.10(b) 的解释为：一个动量为 k 的粒子在运动过程中放出一个动量为 $k-k_1$ 的相互作用量子，本身的动量变为 k_1，过一段时间后又吸收这个量子，动量又变为 k.

§1.6 Dyson 方 程

在许多问题中不能只限不考虑微扰论级数的前几项. 有时需要对所谓"主要图形"的无穷系列求和. 上述格林函数微扰论的优越性就在于微扰论级数某个无穷项的求和可与独特的"图形求和"对应. 下面我们将费曼图分类，这种分析导致 Dyson 方程，它将格林函数的微扰级数用一种特别简明的形式表示出来.

一、自能部分

分析 § 1.5 节中的图形可以看出，任何费曼图都是从一条 G^0 线开始，然后是某个相连图形，最后以一条 G^0 线与 x(或 y) 点相连. 如果我们定义任何与其它部分以两条 G^0 线相连的图形为自能部分，并以 Σ 代表所有自能部分的和，则可将格林函数用图 1.11 表示. 其中粗线代表准确格林函数. 其解析表达式为

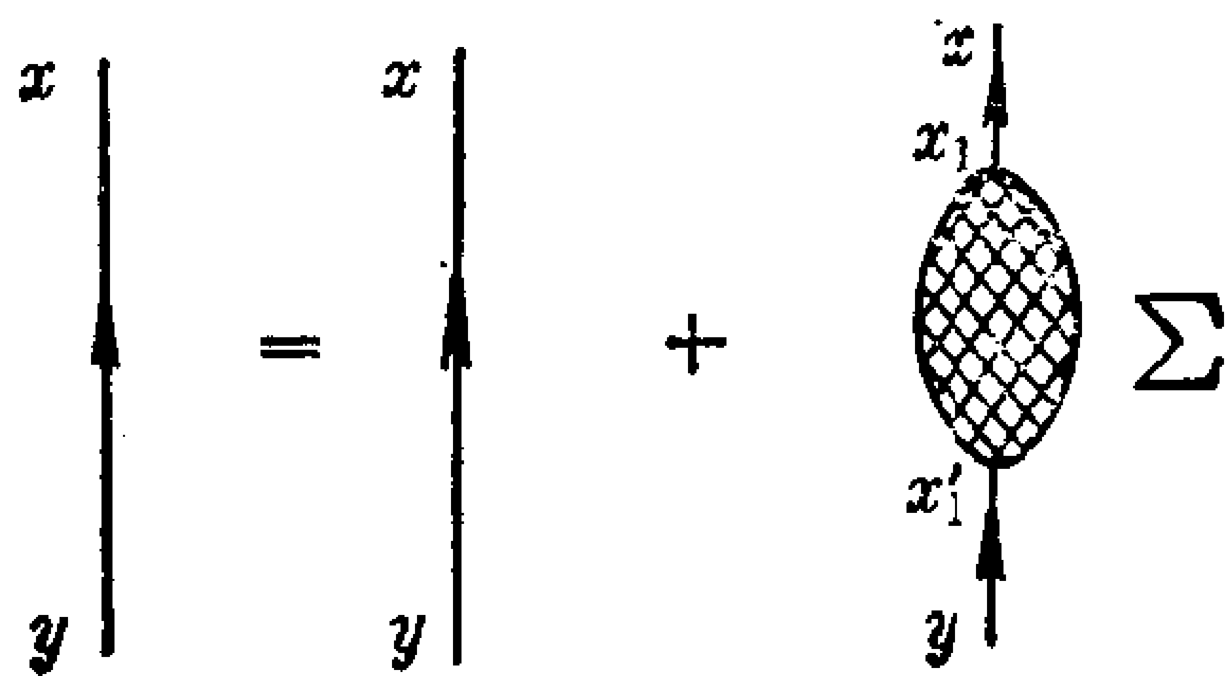


图 1.11

$$G_{\alpha\beta}(x,y)=G^0_{\alpha\beta}(x,y)+\int d^4x_1 d^4x_1' G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\Sigma_{\lambda\mu}(x_1,x_1')G^0_{\mu\beta}(x_1',y) \quad (1.6.1)$$

$\Sigma_{\lambda\mu}(x,x')$称为自能或自能部分.

现在引入正规自能部分的概念. 一个自能部分若不能由切开一条粒子线而分为两部分则称为正规自能部分, 也称为不可约自能. 图 1.12 中(a)、(b)、(c)是非正规自能部分, (d)、(e)、(f)是正

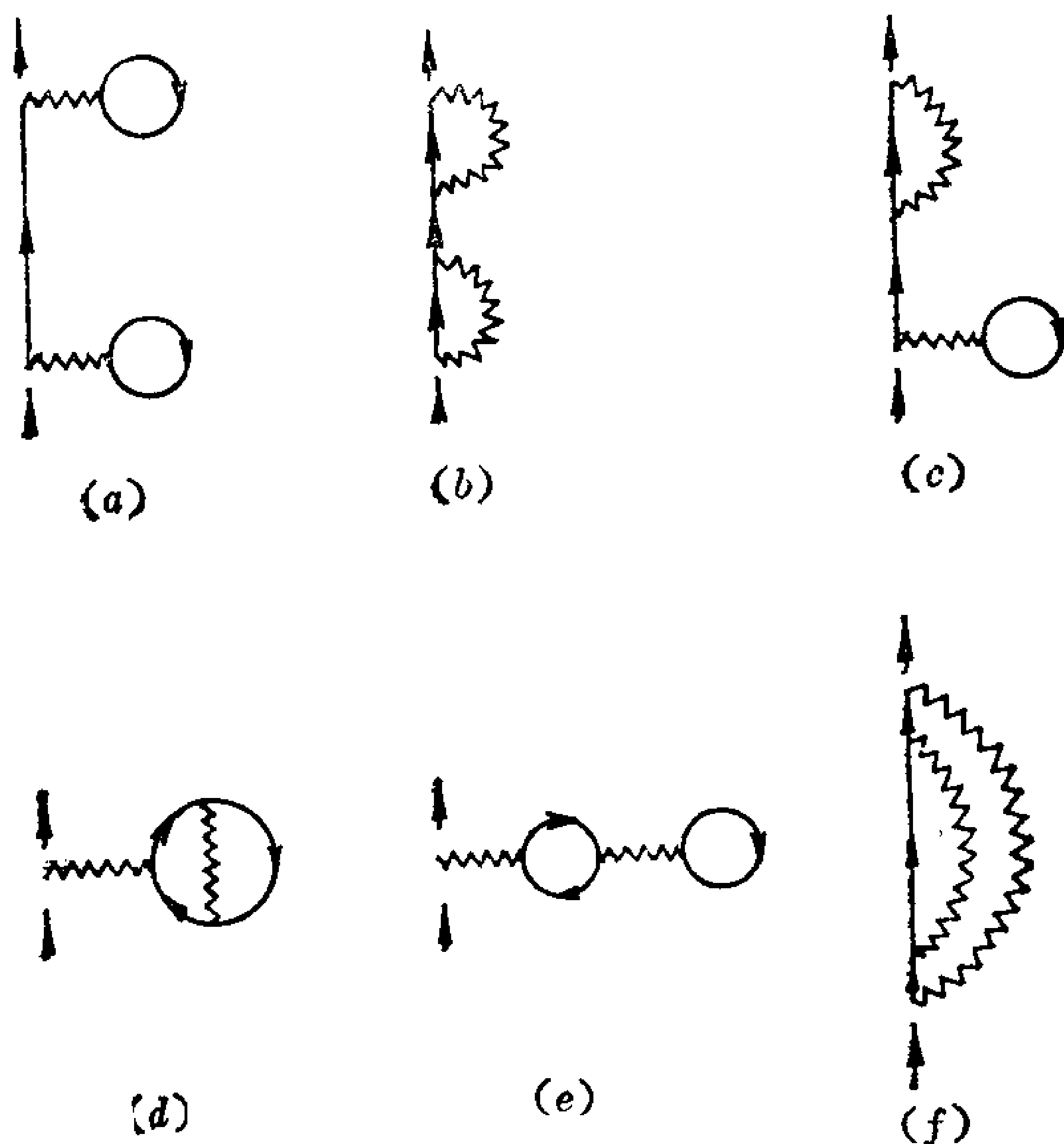


图 1.12

规自能部分. 若以 Σ^*代表所有不可约自能的和, 则由定义可知, 自能是由不可约自能所有可能的重复构成的, 即自能可写为

$$\begin{aligned}\Sigma(x_1,x_1') &= \Sigma^*(x_1,x_1') \\ &+\int d^4x_2 d^4x_2' \Sigma^*(x_1,x_2)G^0(x_2,x_2')\Sigma^*(x_2',x_1') \\ &+\int d^4x_2 d^4x_2' \int d^4x_3 d^4x_3' \Sigma^*(x_1,x_2)G^0(x_2,x_2') \\ &\quad \Sigma^*(x_2',x_3)G^0(x_3,x_3')\Sigma^*(x_3',x_1')+\cdots \quad (1.6.2)\end{aligned}$$

其中 Σ^*、G^0 等是自旋坐标的矩阵. 此式可用图表示为

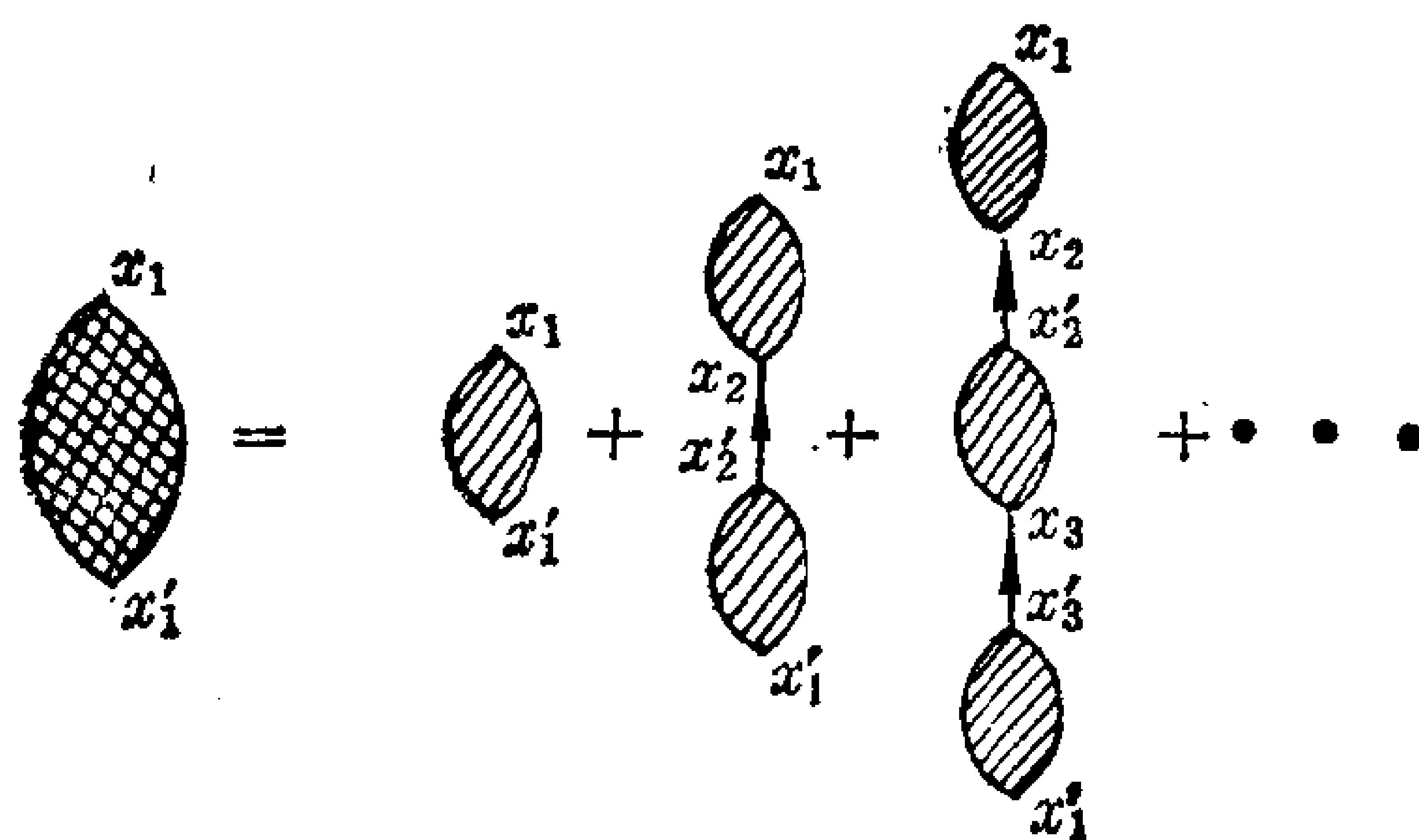


图 1.13

相应的格林函数可表示为

$$G(x,y)=G^0(x,y)+\int d^4x_1 d^4x_1' G^0(x,x_1)\Sigma^*(x_1,x_1')G^0(x_1',y)$$

$$+\int d^4x_1 d^4x_1'\int d^4x_2 d^4x_2' G^0(x,x_1)\Sigma^*(x_1,x_1')G^0(x_1',x_2)\Sigma^*(x_2,x_2')$$

$$G^0(x_2',y)+\cdots \tag{1.6.3}$$

这个级数可写为一个积分方程

$$G_{\alpha\beta}(x,y)=G^0_{\alpha\beta}(x,y)+\int d^4x_1 d^4x_1' G^0_{\alpha\lambda}(x,x_1)\Sigma^*_{\lambda\mu}(x_1,x_1')G_{\mu\beta}(x_1',y) \tag{1.6.4}$$

并可用图表示为

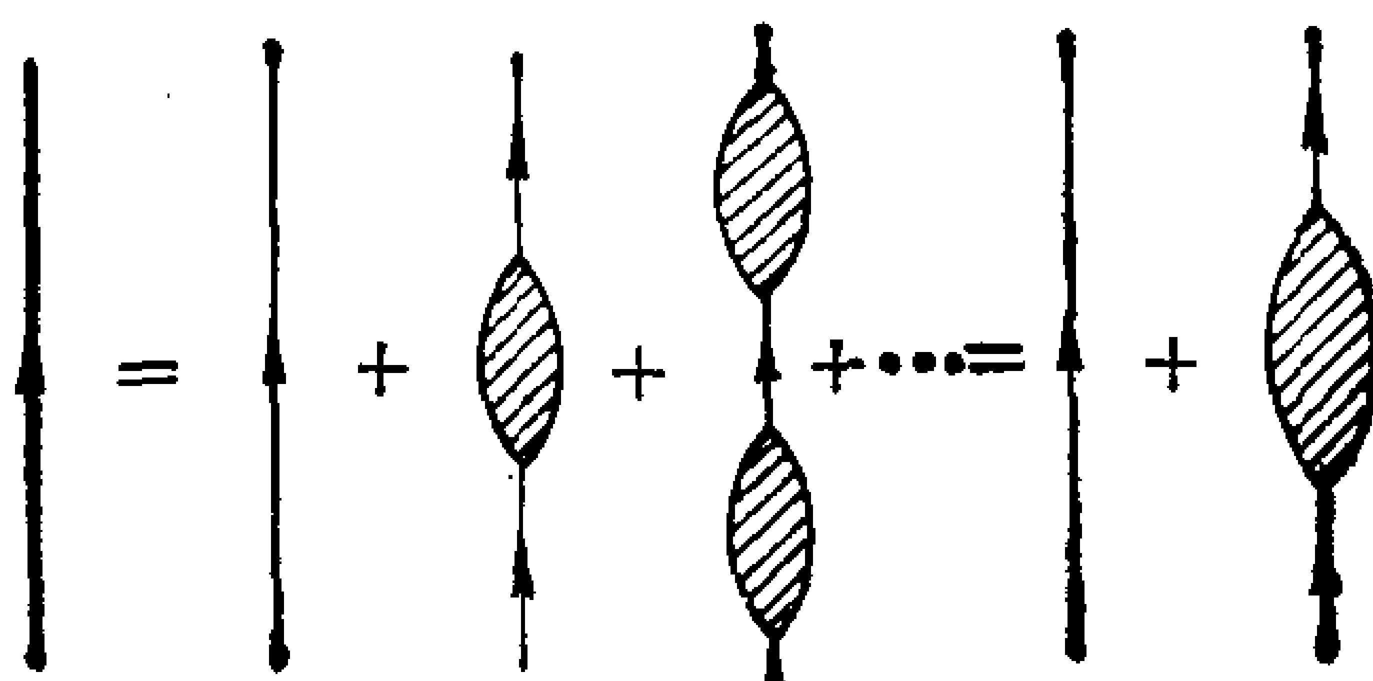


图 1.14

用重复的方法可以证明其正确．这就是 Dyson 方程．

若相互作用有平移不变性，即系统是空间均匀的，则Dyson方程可进一步简化．这时(1.6.4)式中的 G、G^0、Σ^* 只与坐标差有关，可引入傅氏变换．定义 Σ^*的傅氏变换为

$$\Sigma^*(x,y)=\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot(x-y)}\Sigma^*(k) \tag{1.6.5}$$

这样我们就得到动量空间的一个代数方程

$$G_{\alpha\beta}(k)=G^0_{\alpha\beta}(k)+G^0_{\alpha\lambda}(k)\Sigma^*_{\lambda\mu}(k)G_{\mu\beta}(k) \tag{1.6.6}$$

一般情况下 G、G^0 和 Σ^* 对自旋坐标是对角的．由 Dyson 方程可以解出

$$G(k)=\frac{1}{[G^0(k)]^{-1}-\Sigma^*(k)} \tag{1.6.7}$$

G^0 的倒数为

$$[G^0(k)]=\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} \tag{1.6.8}$$

$\pm\mathrm{i}\delta$ 现在已不起作用．因此有

$$G_{\alpha\beta}(k)=G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{\delta_{\alpha\beta}}{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega)} \tag{1.6.9}$$

所以问题归结为求 $\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega)$，它是本征自能部分的和，$\Sigma^*$的图形数目比 G 的图形数目要少的多．

前已指出，准粒子的能量 ε_k 和衰减 γ_k 由 G 延拓到下半平面的极点决定．由(1、6、9)式可以得到

$$\begin{aligned}\varepsilon_k&=\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+\mathrm{Re}\Sigma^*(k,\omega_1)\\ \gamma_k&=\mathrm{Im}\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega_1)\end{aligned} \tag{1.6.10}$$

ω_1 是极点处的 ω 值．这说明了为什么称 Σ^* 为自能，Σ^*是对零级单粒子能量 $\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}$ 的修正．但实际情况并不像 G^0 那样简单．决定准粒子能量和衰减的方程是

$$E_k=\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+\Sigma^*(\boldsymbol{k},E_k)$$

因为 Σ^* 也是 E_k 的函数，我们就得到一个较复杂的方程．

一般说来 Σ^* 是一个复数,因此 (1.6.9) 式的分母中略去了 $\pm i\delta$. 同时 Lehmann 表示保证

$$\mathrm{Im}\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega)\geqslant 0,\quad \omega<\mu$$

$$\mathrm{Im}\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega)\leqslant 0,\quad \omega>\mu$$

这样,化学势可定义为 Σ^* 的不连续点.

作为例子,考虑一级自能部分如图 1.15 所示, 它也是正规自

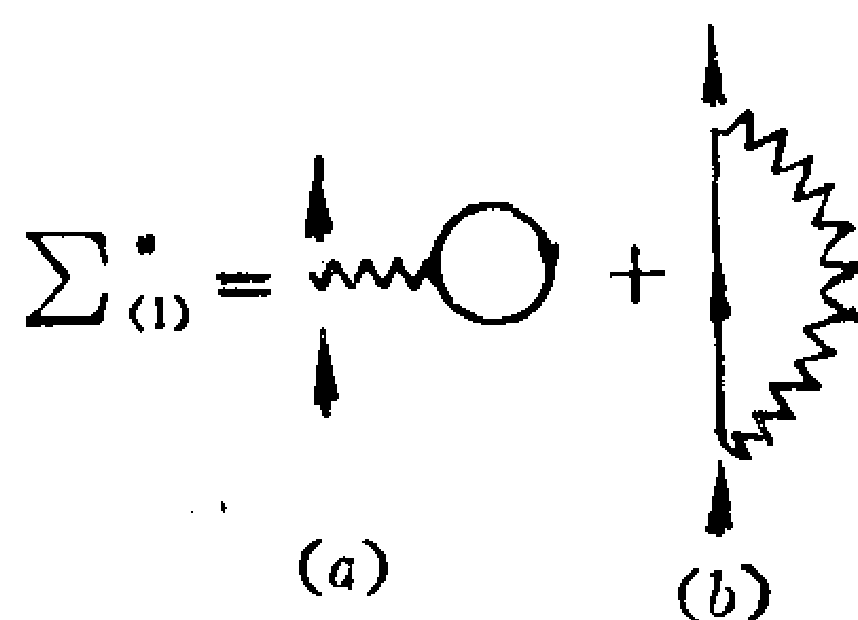


图 1.15

能部分. 图中的箭头表示与格林函数连结的方式. 其表达式为

$$\Sigma^*_{(1)}(k)=nV(0)-\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\theta(k_F-|\boldsymbol{k}|)\qquad(1.6.11)$$

作为一级近似取 $\Sigma^*\approx\Sigma^*_{(1)}$,则格林函数的极点出现在

$$\begin{aligned}\varepsilon^1_{\boldsymbol{k}}&=\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+\Sigma^*_{(1)}(k)\\&=\frac{k^2}{2m}+nV(0)-\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\theta(k_F-|\boldsymbol{k}|)\end{aligned}$$

$$(1.6.12)$$

它决定准粒子的能量 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}$. 在一级近似下准粒子没有衰减.

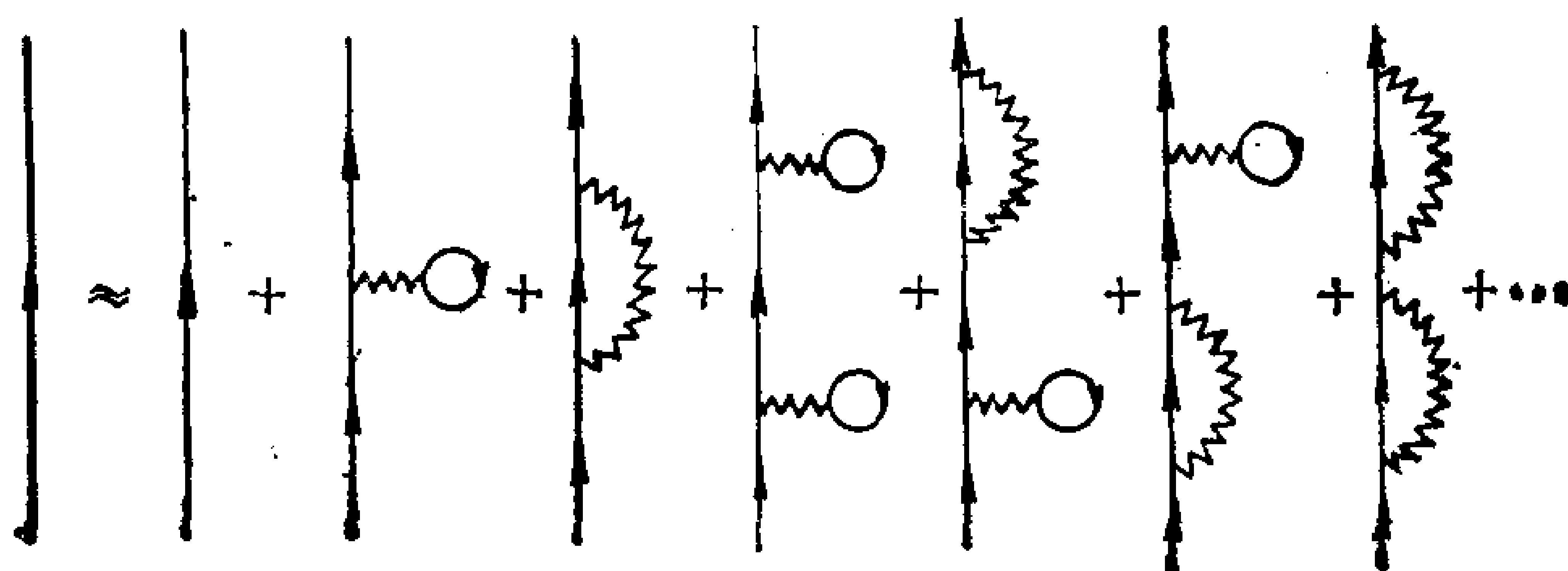


图 1.16

这个例子说明Dyson方程的作用. 它使我们有可能将微扰论中某类图形的无穷级数求和用简单的方式表示出来. 上述 $\Sigma^*_{(1)}$ 近似下的 G 实际上是下面的无穷级数的和.

用Dyson方程可将均匀系统的基态能量写为更简洁的形式. 对自旋为 S 的均匀费密子系统, 由(1.3.32)和(1.6.9)式可以得到

$$
\begin{aligned}
E &= -\mathrm{i}V(2S+1)\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}\frac{1}{2}\left[\frac{\omega+\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}}{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega)}\right]\\
&= -\mathrm{i}V(2S+1)\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}\left\{\left[\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+\frac{1}{2}\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega)\right]G(\boldsymbol{k},\omega)+\frac{1}{2}\right\}\\
&= -\mathrm{i}V(2S+1)\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}\left[\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+\frac{1}{2}\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega)\right]G(\boldsymbol{k},\omega)
\end{aligned}
\tag{1.6.13}
$$

上式最后一行用了下面的等式

$$
\begin{aligned}
\lim_{\eta\to0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta} &\equiv \lim_{\eta\to0^+}\left[\lim_{\epsilon\to0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\epsilon|\omega|}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\right]\\
&= \lim_{\eta\to0^+}\left[\lim_{\epsilon\to0^+}\frac{1}{\pi}\quad\frac{\varepsilon}{\eta^2+\varepsilon^2}\right]=0
\end{aligned}
\tag{1.6.14}
$$

同理, (1.3.38)式可以写为

$$
\begin{aligned}
E-E_0 &= -\frac{1}{2}\mathrm{i}V(2S+1)\int_0^1\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}\left[\frac{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}}{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega)}\right]\\
&= -\frac{1}{2}\mathrm{i}V(2S+1)\int_0^1\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}\Sigma^{*\lambda}(\boldsymbol{k},\omega)G^{\lambda}(\boldsymbol{k},\omega)
\end{aligned}
\tag{1.6.15}
$$

二、极化部分

对粒子间的相互作用势可作类似的分析. 图1-17(a)中的势即(1.4.3)中的势现记为 U_0. 微扰论中也可能出现图1.17(b)、(c)和其它的图。因此粒子间的作用实际上是有效势 U, 它也可表

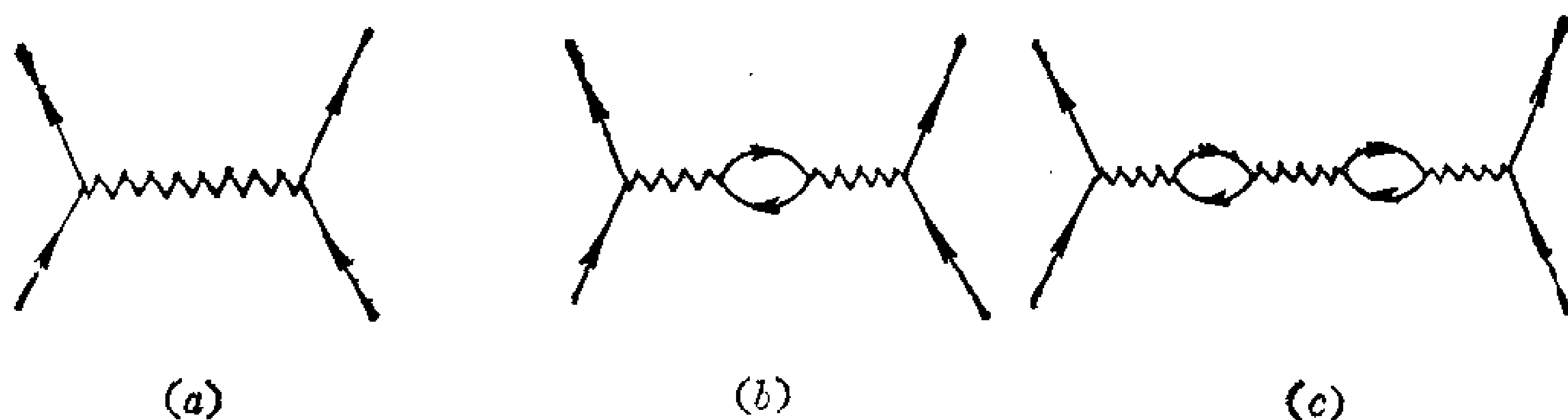


图 1.17

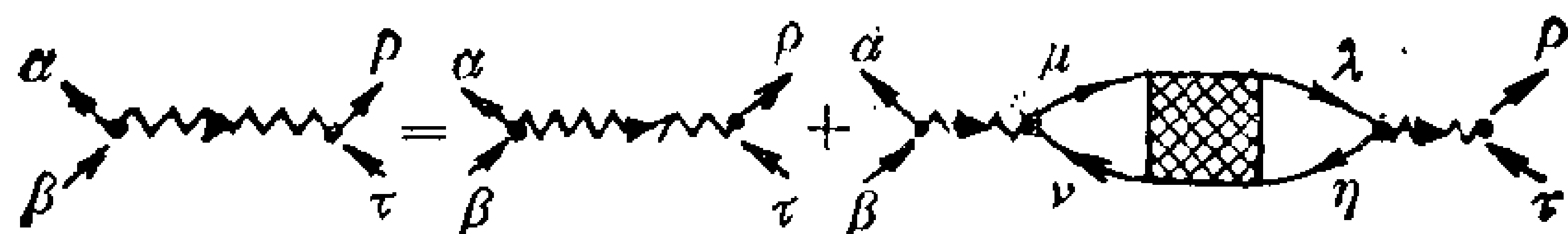


图 1.18

示为图形求和如图 1.18 所示．我们可以写出它的积分方程．对均匀系，在动量空间此方程有较简单的形式．用 $U(q)_{\alpha\beta,\,\rho\tau}$ 代表有效势，则有

$$U(q)_{\alpha\beta,\,\rho\tau}=U_0(q)_{\alpha\beta,\,\rho\tau}+U_0(q)_{\alpha\beta,\,\mu\nu}\Pi_{\mu\nu,\eta\lambda}(q)U_0(q)_{\eta\lambda,\,\rho\tau} \tag{1.6.16}$$

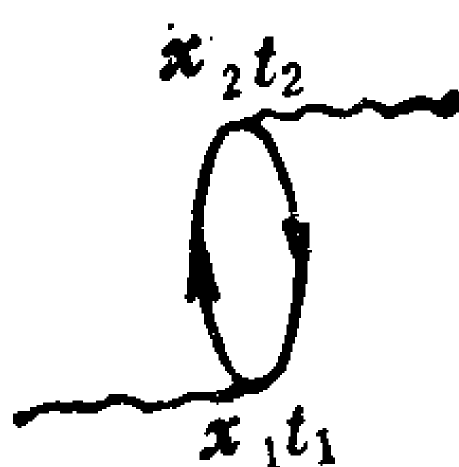
$\Pi_{\mu\nu,\,\eta\lambda}(q)$ 是所有极化部分图形的和，上式可作为 Π 的定义。$\Pi(q)$ 的图形也可分为两类：正规极化部分和非正规极化部分．正规极化部分指不能通过切断一条相互作用线而分为两个不相连部分的图形，其总和记为 Π^*．Π^* 包括图 1.19 中的图．不包含在 Π^* 中的图称为非正规极化部分．

$\Pi^* =$ + + + + ⋯ =

图 1.19

从图 1.19 可以看出极化图形的物理意义．以最低级的极化图为例，将它与势连起来则如下图 (*b*)．在坐标空间中，下面的顶角位于 $(\boldsymbol{x}_1 t_1)$，上面的顶角位于 $(\boldsymbol{x}_2 t_2)$，$t_2>t_1$．在时刻


(a)



(b)

t ($t_1<t<t_2$)则同时存在一个电子和一个空穴，它们形成了一个虚的“偶极子”，使介质极化. $t=t_2$ 时电子-空穴对 在 x_2 消灭. 图1.19表示粒子间的相互作用以各种方式引起介质的“虚极化”.

引入正规极化部分的概念后可将有效势的方程写为一个代数方程.

$$U(q)_{\alpha\beta,\rho\tau}=U_0(q)_{\alpha\beta,\rho\tau}+U_0(q)_{\alpha\beta,\mu\nu}\Pi^*_{\mu\nu,\eta\lambda}(q)U(q)_{\eta\lambda,\rho\tau} \tag{1.6.17}$$

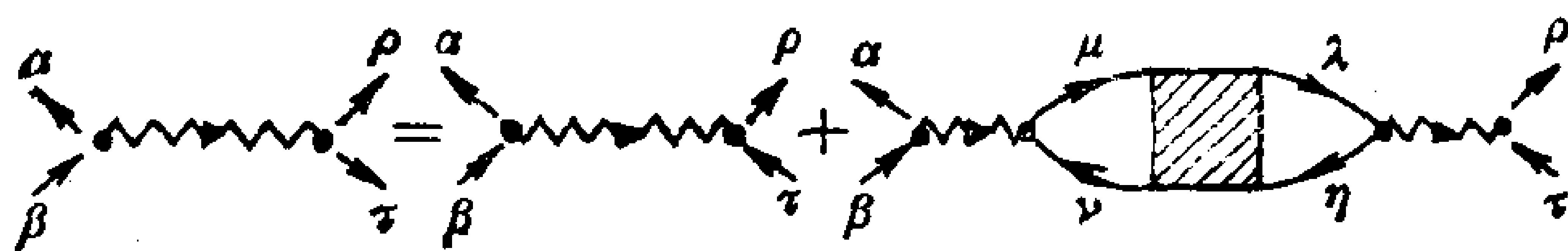


图 1.20

一般说来，方程(1.6.16)、(1.6.17)有较复杂的矩阵结构. 若相互作用势与自旋无关则方程可以化简，这时

$$U_0(q)_{\alpha\beta,\rho\tau}=U_0(q)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\rho\tau} \tag{1.6.18}$$

有效势可写为

$$U(q)_{\alpha\beta,\rho\tau}=U(q)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\rho\tau} \tag{1.6.19}$$

这时 $U(q)$ 由下面的方程决定

$$\begin{aligned}U(q)&=U_0(q)+U_0(q)\Pi(q)U_0(q)\\&=U_0(q)+U_0(q)\Pi^*(q)U(q)\end{aligned} \tag{1.6.20}$$

上式中引入了省略记号

$$\begin{aligned}\Pi(q)&=\Pi_{\alpha\alpha,\lambda\lambda}(q)\\\Pi^*(q)&=\Pi^*_{\alpha\alpha,\lambda\lambda}(q)\end{aligned} \tag{1.6.21}$$

直接求解可以得到

$$U(q)=\frac{U_0(q)}{1-\Pi^*(q)U_0(q)} \tag{1.6.22}$$

定义广义介电函数 $\kappa(q)$

$$U(q)=\frac{U_0(q)}{\kappa(q)} \tag{1.6.23}$$

$\kappa(q)$代表介质极化对粒子间相互作用的屏蔽. 与 (1.6.22) 式比较得到

$$\kappa(q)=1-U_0(q)\Pi^*(q) \tag{1.6.24}$$

介电函数在多体理论中起很重要的作用. 应该指出,$U_0(q)$不依赖于频率,$V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$是瞬时相互作用,但有效势一般与频率有关. 这说明起屏蔽作用的极化电荷有一定惯性, 使有效势不再是瞬时相互作用了.

三、运动方程

求解格林函数的另一方法是推导出格林函数所满足的方程,然后求出满足边界条件的解. 本节讨论格林函数的运动方程. 由它也可推出 Dyson 方程.

Heisenberg 算符的运动方程是

$$\mathrm{i}\frac{\partial\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)}{\partial t}=\left[\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x),\hat{H}\right] \tag{1.6.25}$$

我们限于讨论双粒子相互作用,假定相互作用与自旋无关,

$$\hat{H}=-\int\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x})\frac{\nabla_x^2}{2m}\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})+\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}) \tag{1.6.26}$$

利用 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^+$在同一时刻的对易关系可以求出

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)=-\frac{\nabla^2}{2m}\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)+\int \mathrm{d}^3x'V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\ \hat{\psi}^{*}_{\mathrm{H}\beta}(\boldsymbol{x}'t)\ \hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}$$

$$(\boldsymbol{x}'t)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(\boldsymbol{x}t) \tag{1.6.27}$$

对格林函数第一个变量的时间求微商有

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}G_{\alpha\beta}(x,x')=\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi_0|[\theta(t-t')\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\beta}(x')$$

$$-\theta(t'-t)\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\beta}(x')\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)]|\Psi_0\rangle$$

$$=\langle\Psi_0|[\theta(t-t')\frac{\partial\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)}{\partial t}\ \hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\beta}(x')-\theta(t'-t)$$

$$\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\beta}(x')\ \ \frac{\partial\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)}{\partial t}+\ \delta(t-t')\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\beta}(x')+\delta(t-t')\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\beta}(x')$$

$$\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)]|\Psi_0\rangle$$

$$=\langle\Psi_0|T[\frac{\partial\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)}{\partial t}\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}(x')]|\Psi_0\rangle+\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta}$$

$$\tag{1.6.28}$$

由此得到

$$\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla_x^2}{2m}\right)G_{\alpha\beta}(x,x')$$

$$=\int\mathrm{d}^3x''V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')(-\mathrm{i})\langle\Psi_0|T[\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\gamma}(\boldsymbol{x}''t)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\gamma}(\boldsymbol{x}''t)$$

$$\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(\boldsymbol{x}t)\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\beta}(\boldsymbol{x}',t')]|\Psi_0\rangle+\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta} \tag{1.6.29}$$

方程右边第一项是粒子之间的相互作用引起的，略去此项则得到自由粒子格林函数 G^0 的运动方程为

$$\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla_x^2}{2m}\right)G^0(x-x')=\delta(x-x')$$

因为 $G^0_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}G^0$，上式已消去因子 $\delta_{\alpha\beta}$. G^0 的方程也可写为较普遍的形式

$$\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}_0(x)\right]G^0(x-x')=\delta(x-x')$$

其中 $\hat{H}_0(x)$ 代表任何单体算符. 在格林函数的微扰处理中假定

G^0 的问题是可解的. 若 $\hat{H}_0(x)=-\frac{\nabla_x^2}{2m}$, 则 G^0就是本章已讨论过的自由粒子格林函数. 若 $\hat{H}_0(x)$ 包含其它单体势则 G^0的计算就比较复杂.

(1.6.29)式右边包含 4 个场算符编时乘积的平均值, 我们需引入双粒子格林函数 G^{II}, 定义为

$$G^{II}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(x_1x_2;x_3x_4)=\langle\Psi_0|\hat{\psi}_{H\alpha}(x_1)\hat{\psi}_{H\beta}(x_2)\hat{\psi}^+_{H\gamma}(x_3)\hat{\psi}^+_{H\delta}(x_4)]|\Psi_0\rangle \tag{1.6.30}$$

G^{II}代表 t_4时刻在 $\boldsymbol{x}_4$加入一个粒子、t_3时刻在 $\boldsymbol{x}_3$又加入一个粒子, 它们分别于 t_1、t_2出现在 $\boldsymbol{x}_1$和 $\boldsymbol{x}_2$的几率. 时间顺序不同时 G^{II}代表不同的物理过程:

a、 t_1、$t_2>t_3$、t_4. G^{II}代表一对外加粒子的传播.

b、 t_1、$t_2<t_3$、t_4. G^{II}代表一对空穴的传播

c、 t_1、$t_3>t_2$、 t_4. G^{II}代表粒子一空穴对的传播.

相互作用绘景中 G^{II}可写为

$$G^{II}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(x_1x_2;x_3x_4)=\frac{\langle\Phi_0|T[\hat{\psi}_{I\alpha}(x_1)\hat{\psi}_{I\beta}(x_2)\hat{\psi}^+_{I\gamma}(x_3)\hat{\psi}^+_{I\delta}(x_4)S(\infty,-\infty)]|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|S(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle} \tag{1.6.31}$$

它的计算与单粒子格林函数的微扰计算是相似的. 将分子中的 $S(\infty,-\infty)$按 $\hat{H}_1$的幂展成级数, 然后利用 Wick 定理将级数的每一项表示成含 G^0函数乘积的若干项之和, 每项对应一个费曼图. 这些图形与单粒子格林函数图形的区别在于有 4 个外端点 (x_1、x_2、x_3、x_4). 与单粒子格林函数一样, 只需考虑相连图, 同时略去分母中的$\langle S\rangle$.

G^{II}的相连图分为两类. 一类图形中 x_1 点通过一系列收缩和 x_3点相连, x_2点和 x_4点相连, 但 x_1点和 x_4点是彼此隔离的, 这种图分解为两个彼此无任何线相连的部分. x_1和 x_4相连、 x_2和 x_3相

连而 x_1 和 x_3 之间无任何联系的图形也属于这一类. 这类图中最简单的是零级近似,如下式所示

$$G^0_{\alpha\gamma}(x_1-x_3)G^0_{\beta\delta}(x_2-x_4)-G^0_{\alpha\delta}(x_1-x_4)G^0_{\beta\gamma}(x_2-x_3)$$

$$= \begin{array}{c|c|} x_1 & x_2 \\ \uparrow & \uparrow \\ x_3 & x_4 \end{array} + \begin{array}{c|c|} x_1 & x_2 \\ \uparrow & \uparrow \\ x_4 & x_3 \end{array} \tag{1.6.32}$$

不难看出,只需在 G^0 线上加入自能部分就可得到更复杂的图形。

另一类图包括所有不能分解成独立部分的图形如图 1.21 所示. 其中最简单的图形出现在一级近似如图 1.21(a)所示,它的

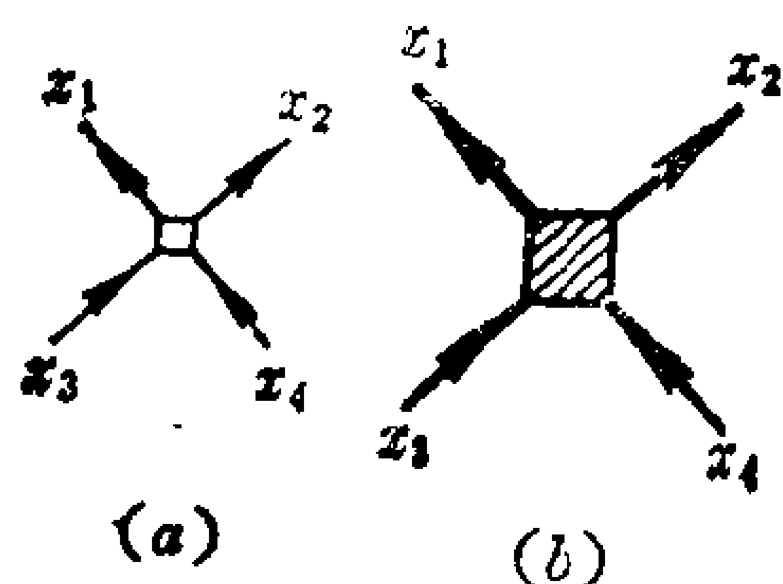


图 1.21

表达式是

$$\mathrm{i}\int G^0_{\alpha\gamma_1}(x_1-x_1')G^0_{\beta\gamma_2}(x_2-x_2')G^0_{\gamma_3\gamma}(x_3'-x_3)G^0_{\gamma_4\delta}(x_4'-x_4)$$

$$\times\Gamma^0_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(x_1'x_2';x_3'x_4')\mathrm{d}^4x_1'\mathrm{d}^4x_2'\mathrm{d}^4x_3'\mathrm{d}^4x_4'$$

将图 1-21(a)的外 G^0 线复杂化并把方框换成更复杂的四端结构就得到更高级的图形. 这时上式中的 G^0 线换成了 G, 而 Γ^0 成为代表一切四端图形总和的 Γ, 图 1.21(a)变成了图 1.21(b). 图 1.21 中的方框称为顶角部分, 记为 $\Gamma'_{\alpha\beta,\gamma\delta}(x_1x_2,x_3x_4)$, 以实心方框表示. 这样,我们可将 G^{II} 写为

$$\begin{aligned}&G^{\mathrm{II}}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(x_1x_2;x_3x_4)\\&=G_{\alpha\gamma}(x_1-x_3)G_{\beta\delta}(x_2-x_4)-G_{\alpha\delta}(x_1-x_4)G_{\beta\gamma}(x_2-x_3)\\&\quad+\mathrm{i}\int\mathrm{d}^4x_1'\cdots\mathrm{d}^4x_4'G_{\alpha\gamma_1}(x_1-x_1')G_{\beta\gamma_2}(x_2-x_2')G_{\gamma_3\gamma}(x_3'-x_3)\\&\quad\times G_{\gamma_4\delta}(x_4'-x_4)\times\Gamma_{\gamma_1\gamma_2;\gamma_3\gamma_4}(x_1'x_2';x_3'x_4')\end{aligned} \tag{1.6.33}$$

上式右边头两项描述独立粒子的传播，并考虑了全同粒子的交换效应．第三项包括粒子之间相互作用的效应．顶角部分Γ描写两个粒子的相互作用．

单粒子格林函数的运动方程可写为

$$\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla_x^2}{2m}\right)G_{\alpha\beta}(x-x')+\mathrm{i}\int \mathrm{d}^3x''V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')G^{\mathrm{II}}_{\gamma\alpha,\gamma\beta}$$

$$\times(\boldsymbol{x}''t,\ \boldsymbol{x}t;\boldsymbol{x}''t^+,\boldsymbol{x}'t')=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta} \tag{1.6.34}$$

根据(1.6.33)式将G^{II}展开并注意到Γ对角标3和4的反对称性，(1.6.34)式可写为

$$\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla_x^2}{2m}\right)G_{\alpha\beta}(x-x')$$

$$+\mathrm{i}\int \mathrm{d}^3x''V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')[G_{\gamma\gamma}(\boldsymbol{x}''t,\boldsymbol{x}''t^+)G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}t,\boldsymbol{x}'t')-$$

$$G_{\gamma\beta}\cdot(\boldsymbol{x}''t,\boldsymbol{x}'t')G_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{x}t,\boldsymbol{x}''t^+)]$$

$$-\int \mathrm{d}^3x''\int \mathrm{d}^4x_1\cdots \mathrm{d}^4x_4G_{\gamma\gamma_1}(\boldsymbol{x}''t,\boldsymbol{x}_1t_1)G_{\alpha\gamma_2}(\boldsymbol{x}t,\boldsymbol{x}_2t_2)G_{\gamma_3\gamma}(\boldsymbol{x}_3t_3,$$

$$\boldsymbol{x}''t)\times G_{\gamma_4\beta}(\boldsymbol{x}_4t_4,\boldsymbol{x}'t')\Gamma_{\gamma_1\gamma_2,\gamma_3\gamma_4}(x_1x_2;x_3x_4)$$

$$=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta} \tag{1.6.35}$$

以上推导表明，单粒子格林函数的运动方程包含双粒子格林函数．用相同方法可以推导出双粒子格林函数的运动方程，显然它将包括三粒子格林函数．依此类推，一个n粒子格林函数的运动方程将包含$n+1$粒子格林函数．我们得到一个耦合方程的无穷序列．它说明我们加入的粒子在介质中的传播是很复杂的．为了得到具体的结论我们必须在某点终止这个无穷系列，即将高级的格林函数用较低级的格林函数表示，或者对无穷序列求和．处理这个问题的另一方法是引入自能概念，即寻找如下形式的解

$$\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla_x^2}{2m}\right)G_{\alpha\beta}(x-x')-\int \mathrm{d}^4x'''\Sigma_{\alpha\delta}(x,x''')G_{\delta\beta}(x''',x')$$

$$=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta} \tag{1.6.36}$$

$\Sigma_{\alpha\nu}(x, x''')$ 称为自能算符，它包括所有相互作用的效应. 像 G^{II} 那样，Σ 也可分为两部分

$$\Sigma = \Sigma_L + \delta\Sigma \tag{1.6.37}$$

与(1.3.35)式比较可以得到

$$\Sigma_L(x, x''') = \mathrm{i}\int \mathrm{d}^3x'' V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')[G_{\gamma\gamma}(\boldsymbol{x}''t, \boldsymbol{x}''t^+)\delta(x-x''')\delta_{\alpha\delta} - G_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{x}t, \boldsymbol{x}''t^+)\delta(t-t''')\delta(\boldsymbol{x}''-\boldsymbol{x}''')\delta_{\gamma\delta}] \tag{1.6.38}$$

$$\delta\Sigma(x, x''') = -\int \mathrm{d}^3x'' \int \mathrm{d}^4x_1 \mathrm{d}^4x_2 \mathrm{d}^4x_3 V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')G_{\gamma\gamma_1}(\boldsymbol{x}''t, \boldsymbol{x}_1t_1) \cdot G_{\alpha\gamma_2}(\boldsymbol{x}t, \boldsymbol{x}_2t_2) \times \Gamma_{\gamma_1\gamma_2,\gamma_3\delta}(x_1x_2, x_3x''')G_{\gamma_3\nu}(\boldsymbol{x}_3t_3, \boldsymbol{x}''t) \tag{1.6.39}$$

利用自由粒子格林函数的运动方程可以将(1.6.36)写为下面的积分方程(G、G^0、Σ 是对自旋的矩阵)

$$G(x, x') = G^0(x, x') + \int \mathrm{d}^4x_1 \mathrm{d}^4x_2 G^0(x, x_1)\Sigma(x_1, x_2)G(x_2, x')$$

这正是方程(1.6.4)，Σ 正是前面引入的 Σ^*. 这个方程也可写为矩阵的形式

$$G = G^0 + G^0\Sigma G$$

这样我们用运动方程的方法也得到了 Dyson 方程. 进一步的讨论与(1.6.5)式以下的讨论相同.

§1.7 线性响应理论($T=0$)

本章前面几节介绍的单粒子格林函数和双粒子格林函数理论适于处理多粒子系统平衡态的问题，不能直接应用于研究系统非平衡态的性质. 对系统加一个随坐标和时间变化的微扰（例如电场、磁场等），系统的响应(如电极化、电流、磁化强度等)与系统本身的性质有关. 对弱的外界扰动 $\hat{H}_1$，响应一般是线性的，与 $\hat{H}_1$ 成

正比．若外界扰动很强则出现非线性响应．本节讨论有外界扰动时怎样求出系统的态和力学量的平均值，只限于介绍 $T=0$ 时的线性响应理论，$T>0$ 时的理论将在第二章介绍．

考虑一个相互作用多粒子系统，其哈密顿量是 $\hat{H}$，Schrödinger 绘景中的态矢量满足下面的方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial|\Psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle}{\partial t}=\hat{H}|\Psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle \tag{1.7.1}$$

其形式解为

$$|\Psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}|\Psi_{\mathrm{S}}(0)\rangle \tag{1.7.2}$$

在 $t=t_0$ 时引入依赖于时间的微扰 $\hat{H}^{\mathrm{ex}}(t)$，则 $t\geqslant t_0$ 时的Schrödinger 方程是

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle=[\hat{H}+\hat{H}^{\mathrm{ex}}(t)]|\Psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle \tag{1.7.3}$$

假定其形式解为

$$|\Psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{U}(t)|\Psi_{\mathrm{S}}(0)\rangle \tag{1.7.4}$$

算符 $\hat{U}(t)$ 应满足因果条件．因为微扰是在 t_0 时加入的，所以有

$$\hat{U}(t)=1,\ t\leqslant t_0 \tag{1.7.5}$$

由(1.7.3)、(1.7.4)式可得到 $\hat{U}(t)$ 的方程：

$$\mathrm{i}\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t}=\hat{H}_{\mathrm{H}}^{\mathrm{ex}}(t)\hat{U}(t) \tag{1.7.6}$$

$$\hat{H}_{\mathrm{H}}^{\mathrm{ex}}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}\hat{H}^{\mathrm{ex}}(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}$$

$\hat{H}_{\mathrm{H}}^{\mathrm{ex}}(t)$ 是 Heisenberg 绘景中的算符．对 $t>t_0$(1.7.6)可用重复的方法求解

$$\hat{U}(t)=1-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'H_{\mathrm{H}}^{\mathrm{ex}}(t')+\cdots \tag{1.7.7}$$

$t<t_0$ 时 $H_{\mathrm{H}}^{\mathrm{ex}}(t)=0$，$\hat{U}(t)=1$，(1.7.7)式满足因果性边界条件．相应的态矢量为

$$|\Psi_S(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\Psi_S(0)\rangle - ie^{-i\hat{H}t}\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}_H^{ex}(t')|\Psi_S(0)\rangle + \cdots$$
$$= e^{-iHt}\left[|\Psi_S(0)\rangle - i\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}_H^{ex}(t')|\Psi_S(0)\rangle + \cdots\right] \tag{1.7.8}$$

Schrödinger 算符的矩阵元是

$$\langle\hat{O}_S(t)\rangle_{ex} = \langle\Psi_S'(t)|\hat{O}_S(t)|\Psi_S(t)\rangle$$
$$= \langle\Psi_S'(0)|\left[1 + i\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}_H^{ex}(t') + \cdots\right] e^{i\hat{H}t}\hat{O}_S\, e^{-i\hat{H}t}$$
$$\times\left[1 - i\int_{t_0}^{t} dt'\hat{H}_H^{ex}(t') + \cdots\right]|\Psi_S(0)\rangle$$
$$= \langle\Psi_H'(0)|\hat{O}_H|\Psi_H(0)\rangle$$
$$+ i\langle\Psi_H(0)|\int_{t_0}^{t} dt'[\hat{H}_H^{ex}(t'), \hat{O}_H(t)]|\Psi_H(0)\rangle$$
$$+ \cdots \tag{1.7.9}$$

上式中只保留到 $\hat{H}^{ex}$的线性项. 角标H表示是不依赖于时间的哈密顿量 $\hat{H}$ 的 Heisenberg 绘景.

若$|\Psi_H\rangle$、$|\Psi_H'\rangle$代表归一化基态$|\Psi_0\rangle$, 则算符 $\hat{A}$ 对基态期望值的线性响应为

$$\delta\langle\hat{A}(t)\rangle = \langle\hat{A}(t)\rangle_{ex} - \langle\hat{A}(t)\rangle$$
$$= i\int_{t_0}^{t} dt'\langle\Psi_0|[\hat{H}_H^{ex}(t'), \hat{A}(t)]|\Psi_0\rangle \tag{1.7.10}$$

通常取 $t_0\to-\infty$, 即在 $t=-\infty$ 时外界微扰等于零, 系统处于平衡态. 一般情况下$\hat{H}^{ex}(t)$ 可写为 $\hat{H}^{ex}(t)=\hat{B}F(t)$, $\hat{B}$ 是一个厄米算符, 是系统本身的算符如电流、粒子数密度等. $F(t)$ 是一个标量函数, 表示微扰随时间的变化. 力学量 $\hat{A}$ 的线性响应可表示为

$$\delta\langle A\rangle = i\int_{-\infty}^{t}\langle\Psi_0|[\hat{B}(t'), \hat{A}(t)]|\Psi_0\rangle F(t')dt' \tag{1.7.11}$$

若引入推迟格林函数 G^R

$$iG_{AB}^R(t,t')=\theta(t-t')\langle\Psi_0|[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]|\Psi_0\rangle \qquad (1.7.12)$$

则(1.7.11)式可写为

$$\delta\langle\hat{A}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}G_{AB}^R(t,t')F(t')\mathrm{d}t' \qquad (1.7.13)$$

由此可见,为计算系统的线性响应我们遇到了推迟格林函数 G_{AB}^R. G_{AB}^R在形式上与(1.3.60)式定义的推迟函数函数 $G_{\alpha\beta}^R$很相似,但二者并不相同,除了对易括弧不同外 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 一般是产生、消灭算符的乘积(如密度、电流等),这点应该注意. 第三章的电子气理论中将介绍 $T=0$K 时线性响应理论应用的例子

参考文献

[1] R.P. Feynman, *Phys. Rev.* **76** (1949), 749. **76** (1949), 769.

[2] A. A. 阿布里科索夫, Л. П. 戈尔可夫, И. Е. 加洛辛斯基, 统计物理学中的量子场论方法, 科学出版社, (1963).

[3] A. L. Fetter, *J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems*, MaGraw-Hill, New York, (1971).

[4] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York, (1981).

[5] J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Benjamin, New York, (1964).

[6] D. Pines, *Elementary Excitations in Solids*, Benjamin, New York, (1963)

[7] 蔡建华等, 量子统计的格林函数理论, 科学出版社 (1982).

第二章 有限温度的格林函数

$T=0$K 时的多粒子系统理论广泛地应用了单粒子格林函数. G 给我们提供了系统处于平衡态时的性质，而且很容易在相互作用绘景中展开为微扰级数. 在有限温度，类似的单粒子格林函数实际上是比较复杂的，不能将第一章所介绍的图解法直接推广到温度大于零的情形. 但对于下面将要介绍的松原函数可以建立类似零温格林函数的图解法。本章首先介绍松原函数 $\mathscr{G}$，$\mathscr{G}$是松原武生(T. Matsubara)1955 年引入的，用$\mathscr{G}$可以计算系统平衡态的热力学性质. 然后介绍依赖于时间的实时格林函数，用它可以计算系统非平衡态的性质. 在非平衡态的研究中也会用到松原函数. 最后介绍 $T>0$ 时的线性响应理论和闭路格林函数

§2.1 松原函数

一、松原函数

在有限温度处理多粒子体系时采用巨正则系统比较方便. 巨正则系综的配分函数是

$$Z=\sum_N\sum_j e^{-\beta(E_j-\mu N_j)}=\sum_N\sum_j\langle N_j|\,e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}|N_j\rangle$$

$$=\mathrm{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}] \tag{2.1.1}$$

j 表示对固定粒子数N的一组量子数，求和是对所有可能的 j 和N 进行的，$\beta=\dfrac{1}{T}$，热力学势是

$$\Omega(T,V,\mu)=-T\ln Z=-\frac{1}{\beta}\ln Z \tag{2.1.2}$$

知道了Ω就可以计算平衡态的热力学量.

巨正则系综的统计算符 ρ 定义为

$$\rho=\frac{1}{Z}\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}=\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{H}+\mu\hat{N})} \tag{2.1.3}$$

任意算符 $\hat{O}$ 的系综平均是

$$\langle\hat{O}\rangle=\mathrm{Tr}(\rho\hat{O})=\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{H}+\mu\hat{N})}\hat{O}] \tag{2.1.4}$$

单粒子松原函数定义如下

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}\tau,\boldsymbol{x}'\tau')=\begin{cases}-\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{H}+\mu\hat{N})}\mathrm{e}^{(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau-\tau')}\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x}) \\ \qquad \mathrm{e}^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau-\tau')}\hat{\psi}^{+}_{\beta}(\boldsymbol{x}')] \quad \tau>\tau' \\ \times\mp\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{H}+\mu\hat{N})}\ \mathrm{e}^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau-\tau')}\hat{\psi}^{+}_{\beta}(\boldsymbol{x}') \\ \quad\times\mathrm{e}^{(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau-\tau')}\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})] \quad \tau<\tau'\end{cases} \tag{2.1.5}$$

其中 $\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})$、$\hat{\psi}^{+}_{\beta}(\boldsymbol{x}')$ 是 Schrödinger 绘景中的场算符. 等式右边第二行前面的"+"对应于费密子，"—"对应于玻色子. τ 的变化区间为$(0,\beta)$. 由(2.1.5)式可以看出，$\mathscr{G}$是温度T和化学势μ的函数. 松原函数只与差 $(\tau-\tau')$ 有关. 如果系统同时又是空间均匀的，则$\mathscr{G}$只依赖于坐标差$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$，于是有 $\mathscr{G}=\mathscr{G}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\tau-\tau')$. $\mathscr{G}(\tau)$是变量 τ 的不连续函数，在 $\tau=0$ 处有一跃变，跃变值可以从$\mathscr{G}$的定义算出. 对费密子有

$$\begin{aligned}\mathscr{G}(\tau)-\mathscr{G}(-\tau)|_{\tau\to0^{+}}&=-\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{H}+\mu\hat{N})}[\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^{+}_{\beta}(\boldsymbol{x}') \\ &\qquad+\hat{\psi}^{+}_{\beta}(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})]\} \\ &=-\delta_{\alpha\beta}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\end{aligned} \tag{2.1.6}$$

可以将(2.1.5)式写成与零温格林函数相同的形式. 定义

$$\hat{K}=\hat{H}-\mu\hat{N} \tag{2.1.7}$$

并引入与"时间" τ 有关的 Heisenberg 算符

$$\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)=\mathrm{e}^{\hat{K}\tau}\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\hat{K}\tau} \tag{2.1.8}$$

$$\hat{\psi}^{+}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)=\mathrm{e}^{\hat{K}\tau}\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-\hat{K}\tau} \tag{2.1.9}$$

注意 $\hat{\psi}^{+}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)$不是 $\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)$的共轭算符，因为 τ 是实数. 如果将τ重新解释为复变数并解析延拓到纯虚数值$\tau=\mathrm{i}t$，则得到的 $\hat{\psi}^{+}_{K\alpha}(\boldsymbol{x},\mathrm{i}t)$与 $\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x},\mathrm{i}t)$互为共轭算符，并在形式上与 (1.2.28)式定义的 Heisenberg 算符相同，只是以 $\hat{K}$ 代替了 $\hat{H}$. 因此 (2.1.8)式、(2.1.9)式定义的算符又称为虚时算符，松原函数又称为虚时格林函数. 用(2.1.8)式、(2.1.9)式可将(2.1.5)式写为

$$\begin{aligned}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}\tau,\boldsymbol{x}'\tau')&=-\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{K})}T_{\tau}[\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)\hat{\psi}^{+}_{K\beta}(\boldsymbol{x}'\tau')]\}\\&=-\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}T_{\tau}[\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)\hat{\psi}^{+}_{K\beta}(\boldsymbol{x}'\tau')]\}\\&=-\langle T_{\tau}[\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)\hat{\psi}^{+}_{K\beta}(\boldsymbol{x}'\tau')]\rangle\end{aligned} \tag{2.1.10}$$

上式中$\langle\cdots\rangle$表示对巨正则系综平均，T_{τ} 代表编时算符. T_{τ} 乘积中算符自左至右按“时间”τ 的递减顺序排列. 对费密子 T_{τ} 运算包含$(-1)^{P}$因子，P 是由编时前的算符顺序变换到编时顺序所需的置换数. (2.1.10)式中 Tr 表示对系统的一个完全态组求迹.

二、松原函数和热力学函数

原则上松原函数决定系统的全部热力学性质，求得松原函数就可计算系统的热力学量. 总粒子数算符是

$$\hat{N}=\int\mathrm{d}^{3}x\,\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\,\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x}) \tag{2.1.11}$$

$\hat{N}$ 的系综平均值可用松原函数表示为

$$N(T,V,\mu)=\langle\hat{N}\rangle=\mp\int\mathrm{d}^{3}x\,\mathscr{G}_{\alpha\alpha}(\boldsymbol{x}\tau,\boldsymbol{x}\tau^{+})\quad \tau^{+}=\tau+0^{+} \tag{2.1.12}$$

类似地，任何单体算符的系综平均都可以用$\mathscr{G}$表示. 设 $\hat{J}$ 为(1.3.11)式定义的单粒子算符，则有

$$\langle J\rangle=\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{J})=\sum_{\alpha,\beta}\int \mathrm{d}^3x \lim_{x'\to x} J_{\beta\alpha}(x)\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{\psi}_\beta^+(x')\hat{\psi}_\alpha(x)]$$

$$=\mp\sum_{\alpha,\beta}\int \mathrm{d}^3x \lim_{x'\to x}\lim_{\tau'\to\tau^+} J_{\beta\alpha}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x\tau;x'\tau')$$

$$=\mp\int \mathrm{d}^3x \lim_{x'\to x}\lim_{\tau'\to\tau^+}\mathrm{Tr}[J(x)\mathscr{G}(x\tau,x'\tau')]$$

现在讨论有二体相互作用的费密子系统．在 Schrödinger 绘景中其哈密顿量是

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1=-\int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}_\alpha^+(x)\frac{\nabla_x^2}{2m}\hat{\psi}_\alpha(x)+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2\hat{\psi}_\alpha^+(x_1)$$
$$\times\hat{\psi}_\beta^+(x_2)V(x_1-x_2)\hat{\psi}_\beta(x_2)\hat{\psi}_\alpha(x_1) \qquad (2.1.13)$$

系统的动能可表示为

$$动能=\langle\hat{H}_0\rangle$$
$$=\mp\int \mathrm{d}^3x \lim_{x'\to x}\left(-\frac{\nabla_x^2}{2m}\right)\mathscr{G}_{\alpha\alpha}(x\tau,x'\tau^+) \qquad (2.1.14)$$

系统势能的表示需要引入双粒子松原函数，但利用场算符的运动方程仍可将势能用$\mathscr{G}$表示．$\hat{\psi}$ 的运动方程是

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{\psi}_{K\alpha}(x\tau)=\frac{\partial}{\partial\tau}[\mathrm{e}^{\hat{K}\tau}\hat{\psi}_\alpha(x)\mathrm{e}^{-\hat{K}\tau}]$$
$$=\mathrm{e}^{\hat{K}\tau}[\hat{K},\hat{\psi}_\alpha(x)]\mathrm{e}^{-\hat{K}\tau}$$
$$=[\hat{K},\hat{\psi}_{K\alpha}(x\tau)] \qquad (2.1.15)$$

通过运算可以求出

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{\psi}_{K\alpha}(x\tau)=\frac{\nabla^2}{2m}\hat{\psi}_{K\alpha}(x\tau)+\mu\hat{\psi}_{K\alpha}(x\tau)$$
$$-\int \mathrm{d}^3x''\hat{\psi}_{K\gamma}^+(x''\tau)V(x-x'')\hat{\psi}_{K\gamma}(x''\tau)\hat{\psi}_{K\alpha}(x\tau) \qquad (2.1.16)$$

由此得到单粒子松原函数满足下面的方程

$$\lim_{\tau'\to\tau^+}\left[\frac{\partial}{\partial\tau}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}\tau,\boldsymbol{x}'\tau')\right]=\mp\mathrm{Tr}\left[\rho\hat{\psi}^+_{K\beta}(\boldsymbol{x}'\tau)\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)\right]$$

$$=\mp\mathrm{Tr}\left\{\rho\hat{\psi}^+_{K\beta}(\boldsymbol{x}'\tau)\left[\left(\frac{\nabla_x}{2m}+\mu\right)\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)\right.\right.$$

$$\left.\left.-\int\mathrm{d}^3x''\hat{\psi}^+_{K\gamma}(\boldsymbol{x}''\tau)\hat{\psi}_{K\gamma}(\boldsymbol{x}''\tau)V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)\right]\right\} \quad (2.1.17)$$

利用这个结果可将势能写为

$$\langle\hat{H}_1\rangle=\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x''V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')\mathrm{Tr}[\rho\hat{\psi}^+_\alpha(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^+_\gamma(\boldsymbol{x}'')\hat{\psi}_\gamma(\boldsymbol{x}'')\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})]$$

$$=\mp\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3x\lim_{\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}}\lim_{\tau'\to\tau^+}\left[-\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right]\mathscr{G}_{\alpha\alpha}(\boldsymbol{x}\tau,\boldsymbol{x}'\tau') \quad (2.1.18)$$

由(2.1.14)、(2.1.18)式可得到内能的表达式为

$$\boldsymbol{E}=\langle\hat{H}\rangle=\mp\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3x\lim_{\tau'\to\tau^+}\lim_{\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}}\left[-\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{\nabla^2_x}{2m}+\mu\right]\times\mathscr{G}_{\alpha\alpha}(\boldsymbol{x}\tau,\boldsymbol{x}'\tau') \quad (2.1.19)$$

下面推导热力学势的公式. 将哈密顿量写为

$$\hat{K}=\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1 \quad (2.1.20)$$

$$\hat{K}_0=\hat{H}_0-\mu\hat{N},\quad \hat{K}_1=\hat{H}_1$$

$0\leqslant\lambda\leqslant1$. $\lambda=0$ 描写自由粒子系统，$\lambda=1$ 时我们得到实际的多粒子系统. 对应 $\hat{K}(\lambda)$ 的巨配分函数是

$$Z_\lambda=\mathrm{e}^{-\beta\Omega_\lambda}=\mathrm{Tr}\mathrm{e}^{-\beta\hat{K}(\lambda)} \quad (2.1.21)$$

对 λ 求导数得到

$$\frac{\partial\Omega_\lambda}{\partial\lambda}=-\frac{1}{\beta}\frac{1}{Z_\lambda}\frac{\partial Z_\lambda}{\partial\lambda} \quad (2.1.22)$$

为了计算导数将(2.1.21)式中的算符指数展开为

$$Z_\lambda=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^n}{n!}\mathrm{Tr}(\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1)^n \quad (2.1.23)$$

求导数得到

$$\frac{\partial Z_\lambda}{\partial\lambda}=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\beta)^n}{n!}\frac{\partial}{\partial\lambda}\mathrm{Tr}(\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1)$$

对第 n 项求导数时应依次对 n 个因子 $(\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1)$ 中的每一个求导数. 这样得到 n 项,其中每项有一个因子 $\hat{K}_1$, 这个因子出现在所有可能的位置. 根据 Tr 符号下算符的循环不变性质, 这些项可以重新排列. 这样我们得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial Z_\lambda}{\partial\lambda}&=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\beta)^n}{n!}n\mathrm{Tr}[(\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1)^{n-1}\hat{K}_1]\\&=-\beta\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\beta)^{n-1}}{(n-1)!}\mathrm{Tr}[(\hat{K}_0+\lambda\hat{K}_1)^{n-1}\hat{K}_1]\\&=-\beta\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{-\beta\hat{K}(\lambda)}\hat{K}_1]\\&=-\frac{\beta}{\lambda}\mathrm{e}^{-\beta\Omega_\lambda}\langle\lambda\hat{K}_1\rangle_\lambda\end{aligned}\tag{2.1.24}$$

由(2.1.22)式和(2.1.24)式得到

$$\frac{\partial\Omega_\lambda}{\partial\lambda}=\frac{1}{\lambda}\langle\lambda\hat{K}_1\rangle_\lambda=\frac{1}{\lambda}\langle\lambda\hat{H}_1\rangle_\lambda\tag{2.1.25}$$

积分得到

$$\Omega-\Omega_0=\int_0^1\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\langle\lambda\hat{H}_1\rangle_\lambda\tag{2.1.26}$$

Ω_0 是相应于 $\hat{H}_0$ 的热力学势,假定它是可以计算的. 用(2.1.18)式可将这个公式用单粒子松原函数表示为

$$\begin{aligned}\Omega(T,V,\mu)&=\Omega_0(T,V,\mu)\\&\quad\mp\int_0^1\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\int\mathrm{d}^3x\lim_{x'\to x}\lim_{\tau'\to\tau^+}\frac{1}{2}\left[-\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right]\\&\quad\times\mathrm{Tr}\mathscr{G}^\lambda(x\tau,x'\tau')\end{aligned}\tag{2.1.27}$$

Tr 是对自旋矩阵的对角项求和. 知道了 Ω 就可求出熵函数和自由能,从而计算出系统的全部热力学性质.

三、松原函数的一个重要性质

由松原函数的定义(2.1.5)式可以看出，$\mathscr{G}$是时间差$(\tau_1-\tau_2)=\tau$的函数，τ的变化区间是$(-\beta,\beta)$. 松原函数可写为

$$\mathscr{G}(\tau)=\begin{cases}-\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{H}+\mu\hat{N})}\mathrm{e}^{(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau}\hat{\psi}_\alpha(x_1)\mathrm{e}^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau}\hat{\psi}^+_\beta(x_2)] \\ \qquad\qquad 0<\tau<\beta \\ \mp\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{\beta(\Omega-H+\mu N)}\mathrm{e}^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau}\hat{\psi}^+_\beta(x_2)\mathrm{e}^{(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau}\hat{\psi}_\alpha(x_1)] \\ \qquad\qquad -\beta<\tau<0\end{cases} \tag{2.1.28}$$

为了书写简单上式左边略去了空间和自旋坐标. 在求迹号下可将算符循环置换，并注意到热力学势Ω不是算符而是β和μ的标量函数，则可得到

$$\begin{aligned}\mathscr{G}(\tau<0)&=\mp\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{H}+\mu\hat{N})}\mathrm{e}^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau}\hat{\psi}^+_\beta(x_2)\ \mathrm{e}^{(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau}\hat{\psi}_\alpha(x_1)] \\ &=\mp\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{H}+\mu\hat{N})}\mathrm{e}^{(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau+\beta)}\hat{\psi}_\alpha(x_1)\mathrm{e}^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau+\beta)}\hat{\psi}^+_\beta(x_2)]\end{aligned} \tag{2.1.29}$$

由于$|\tau|<\beta$，所以$\tau+\beta>0$. 比较(2.1.28)式和(2.1.29)式可以得到

$$\mathscr{G}(\tau<0)=\pm\mathscr{G}(\tau+\beta>0) \tag{2.1.30}$$

这是松原函数的一个重要性质. $\mathscr{G}$在负“时间”$(\tau<0)$和正“时间”$(\tau>0)$区域内的值之间的关系由(2.1.30)式表示. 松原函数在$-\beta<(\tau-\tau')<\beta$区间中有周期性，这个性质对以后的讨论是重要的.

与绝对零度的格林函数不同，松原函数作傅氏变换时具有分立的频率ω_n. 因为$\mathscr{G}(\tau)$的定义区间为$(-\beta,\beta)$，所以

$$\mathscr{G}(\tau)=\frac{1}{\beta}\sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_n) \tag{2.1.31}$$

$$\omega_n=\frac{n\pi}{\beta} \tag{2.1.32}$$

(2.1.31)式的逆变换为

$$\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_n)=\frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta}\mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}(\tau)$$

利用(2.1.30)式有

$$\begin{aligned}\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_n)&=\frac{1}{2}\int_{-\beta}^{0}\mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}(\tau)+\frac{1}{2}\int_{0}^{\beta}\mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}(\tau)\\&=\pm\frac{1}{2}\int_{-\beta}^{0}\mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}(\tau+\beta)+\frac{1}{2}\int_{0}^{\beta}\mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}(\tau)\\&=\frac{1}{2}(1\pm \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\beta})\int_{0}^{\beta}\mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}(\tau)\end{aligned}\tag{2.1.33}$$

考虑到 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\beta}=(-1)^n$，因子 $\frac{1}{2}(1\pm \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\beta})$ 可简化为

费密子系统 $\frac{1}{2}(1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\beta})=\begin{cases}1, & n\text{ 为奇数}\\0, & n\text{ 为偶数}\end{cases}$

玻色子系统 $\frac{1}{2}(1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\beta})=\begin{cases}0, & n\text{ 为奇数}\\1, & n\text{ 为偶数}\end{cases}$

这样 $\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_n)$ 可重写为

$$\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_n)=\int_{0}^{\beta}\mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}(\tau)\tag{2.1.34}$$

$$\omega_n=\begin{cases}\dfrac{(2n+1)\pi}{\beta} & \text{费密子}\\[2ex]\dfrac{2n\pi}{\beta} & \text{玻色子}\end{cases}\tag{2.1.35}$$

因此，傅氏级数(2.1.31)式中玻色子只限于 n 取偶数的项，费密子只限于 n 取奇数的项.

四、自由粒子系统的松原函数

松原函数的微扰计算中自由粒子松原函数 $\mathscr{G}^0$ 起着重要作用，下面计算 $\mathscr{G}^0$. 由于粒子间没有相互作用，系统的能量可表示为个

别粒子能量之和，

$$\hat{H}-\mu\hat{N}=\hat{H}_0-\mu\hat{N}$$

$$=\sum_{k}(\varepsilon_{k}^{0}-\mu)C_{k\alpha}^{+}C_{k\alpha} \tag{2.1.36}$$

没有外场时单粒子态是平面波，可将 Schrödinger 绘景中的场算符展开为

$$\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k}C_{k\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot x} \tag{2.1.37}$$

$$\hat{\psi}_{\alpha}^{+}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k}C_{k\alpha}^{+}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot x} \tag{2.1.38}$$

对 $C_{k\alpha}$、$C_{k\alpha}^{+}$ 容易证明下式

$$\mathrm{e}^{(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau}C_{k\alpha}\mathrm{e}^{-(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau}=C_{k\alpha}\mathrm{e}^{-(\varepsilon_{k}^{0}-\mu)\tau}$$

$$\mathrm{e}^{(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau}C_{k\alpha}^{+}\mathrm{e}^{-(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau}=C_{k\alpha}^{+}\mathrm{e}^{(\varepsilon_{k}^{0}-\mu)\tau} \tag{2.1.39}$$

上式可通过计算直接证明，但比较简单的方法是利用 $C_{k\alpha}(\tau)$的运动方程推导(2.1.39)式. 由此可求出 “Heisenberg 绘景”中的场算符为

$$\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)=\mathrm{e}^{(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau}\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-(\hat{H}_0-\mu N)\tau}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot x-(\varepsilon_{k}^{0}-\mu)\tau}C_{k\alpha}$$

$$\hat{\psi}_{K\alpha}^{+}(\boldsymbol{x}\tau)=\mathrm{e}^{(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau}\hat{\psi}_{\alpha}^{+}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-(\hat{H}_0-\mu N)\tau}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot x+(\varepsilon_{k}^{0}-\mu)\tau}C_{k\alpha}^{+} \tag{2.1.40}$$

根据定义

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}^{0}(\boldsymbol{x}_1\tau_1,\boldsymbol{x}_2\tau_2)=-\mathrm{e}^{\beta\Omega_0}\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}T_{\tau}[\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}_1\tau_1)$$

$$\times\hat{\psi}_{K\beta}^{+}(\boldsymbol{x}_2\tau_2)]\} \tag{2.1.41}$$

首先考虑 $\tau_1>\tau_2$，这时

$$
\begin{aligned}
&\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}_1\tau_1,\boldsymbol{x}_2\tau_2)\\
&=-\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}_2)-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)\tau_1+(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}'}-\mu)\tau_2}\times\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{\beta(\Omega_0-\hat{H}_0+\mu\hat{N})}\\
&\qquad\times C_{\boldsymbol{k}\alpha}C^+_{\boldsymbol{k}'\beta}]\\
&=-\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}_2)-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)\tau_1+(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}'}-\mu)\tau_2}\times\langle C_{\boldsymbol{k}\alpha}C^+_{\boldsymbol{k}'\beta}\rangle_0 \qquad (2.1.42)
\end{aligned}
$$

只有 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$、$\alpha=\beta$ 时乘积 $C_{\boldsymbol{k}\alpha}C^+_{\boldsymbol{k}'\beta}$ 才具有不等于零的矩阵元，因此有

$$
\begin{aligned}
\langle C_{\boldsymbol{k}\alpha}C^+_{\boldsymbol{k}'\beta}\rangle_0&=\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\alpha\beta}[1\pm\langle C^+_{\boldsymbol{k}\alpha}C_{\boldsymbol{k}\alpha}\rangle_0]\\
&=\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\alpha\beta}[1\pm n^0_{\boldsymbol{k}}] \qquad (2.1.43)
\end{aligned}
$$

$$
n^0_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)}\mp1} \qquad (2.1.44)
$$

式中上面的"－"对应玻色统计，下面的"＋"对应费密统计．代入(2.1.42)式得到

$$
\begin{aligned}
&\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}_1\tau_1,\boldsymbol{x}_2\tau_2)\\
&=-\frac{\delta_{\alpha\beta}}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)(\tau_1-\tau_2)}(1\pm n^0_{\boldsymbol{k}}) \quad \tau_1>\tau_2 \qquad (2.1.45)
\end{aligned}
$$

令 $V\to\infty$，求和变为积分

$$
\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\longrightarrow\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}
$$

我们得到

$$
\begin{aligned}
\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}_1\tau_1,\boldsymbol{x}_2\tau_2)=-\delta_{\alpha\beta}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)(\tau_1-\tau_2)}\\
\times(1\pm n^0_{\boldsymbol{k}}) \quad \tau_1>\tau_2 \qquad (2.1.46)
\end{aligned}
$$

对 $\tau_1<\tau_2$ 作类似的计算得到

$$
\begin{aligned}
\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}_1\tau_1,\boldsymbol{x}_2\tau_2)=\mp\delta_{\alpha\beta}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)(\tau_1-\tau_2)}n^0_{\boldsymbol{k}}\\
\tau_1<\tau_2 \qquad (2.1.47)
\end{aligned}
$$

(2.1.46)式、(2.1.47)式表明$\mathscr{G}^0$仅是$(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)$和$(\tau_1-\tau_2)$的函数，这是空间和“时间”均匀性的结果.

$\mathscr{G}^0$的傅氏变换是

$$\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}\tau)=\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2,\tau_1-\tau_2)$$

$$=\frac{1}{\beta}\sum_n\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\mathrm{i}\omega_n) \qquad (2.1.48)$$

傅氏系数为

$$\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\mathrm{i}\omega_n)=\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\int\mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}+\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x},\tau)$$

将(2.1.46)式代入此式并完成对空间的积分，得到

$$\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\mathrm{i}\omega_n)=-\delta_{\alpha\beta}\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)\tau+\mathrm{i}\omega_n\tau}\quad(1\pm n^0_{\boldsymbol{k}}) \qquad (2.1.49)$$

对费密子，$\omega_n=(2n+1)\pi/\beta$，$n^0_{\boldsymbol{k}}=[\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)}+1]^{-1}$，代入上式得到

$$\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\mathrm{i}\omega_n)=-\delta_{\alpha\beta}\left[1-\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)}+1}\right]\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)\tau+\mathrm{i}\omega_n\tau}$$

积分得到

$$\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},i\omega_n)=\frac{-(1-n^0_{\boldsymbol{k}})[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\beta}\mathrm{e}^{-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)\beta}-1]}{\mathrm{i}\omega_n-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+\mu}\delta_{\alpha\beta}$$

因为

$$\beta\mathrm{i}\omega_n=\mathrm{i}(2n+1)\pi$$

$$\mathrm{e}^{\beta\mathrm{i}\omega_n}=-1$$

因此有

$$\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\mathrm{i}\omega_n)=\frac{(1-n^0_{\boldsymbol{k}})[\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)}+1]}{\mathrm{i}\omega_n-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+\mu}\delta_{\alpha\beta}$$

利用下式

$$1-n^0_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)}+1}$$

就可得到

$$\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\mathrm{i}\omega_n - \varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} + \mu} \tag{2.1.50}$$

通过类似的计算，对玻色子系统也可求得

$$\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}, \mathrm{i}\omega_n) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\mathrm{i}\omega_n - \varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} + \mu} \tag{2.1.51}$$

利用(2.1.12)式、(2.1.19)式及(2.1.48)式可求出自由粒子系统的平均粒子数 N_0 和平均能量 E_0 为

$$N_0(T, V, \mu) = \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} - \mu)} \mp 1}$$

$$E_0(T, V, \mu) = \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} - \mu)} \mp 1}$$

§2.2 有限温度的微扰论

为了进行松原函数的微扰计算需要引入一种独特的相互作用绘景，它与量子场论中的相互作用绘景很相似。

一、相互作用绘景

定义相互作用绘景算符 $\hat{O}_{\mathrm{I}}$ 和 Heisenberg 绘景算符 $\hat{O}_K$ 的变换为

$$\begin{aligned} \hat{O}_K(\tau) &= \mathrm{e}^{\hat{K}\tau} \hat{O}_{\mathrm{S}} \mathrm{e}^{-\hat{K}\tau} \\ \hat{O}_{\mathrm{I}}(\tau) &= \mathrm{e}^{\hat{K}_0\tau} \hat{O}_{\mathrm{S}} \mathrm{e}^{-\hat{K}_0\tau} \end{aligned} \tag{2.2.1}$$

由此可以求出 $\hat{O}_K(\tau)$ 与 $\hat{O}_{\mathrm{I}}(\tau)$ 的关系为

$$\begin{aligned} \hat{O}_K(\tau) &= \mathrm{e}^{\hat{K}\tau} \mathrm{e}^{-\hat{K}_0\tau} O_{\mathrm{I}}(\tau) \mathrm{e}^{\hat{K}_0\tau} \mathrm{e}^{-\hat{K}\tau} \\ &= \hat{U}(0, \tau) \hat{O}_{\mathrm{I}} \hat{U}(\tau, 0) \end{aligned} \tag{2.2.2}$$

式中 $\hat{U}$ 算符的定义是

$$\hat{U}(\tau_1, \tau_2) = \mathrm{e}^{\hat{K}_0\tau_1} \mathrm{e}^{-\hat{K}(\tau_1 - \tau_2)} \mathrm{e}^{-\hat{K}_0\tau_2} \tag{2.2.3}$$

$\hat{U}$ 并不是么正算符，但具有以下性质

$$\hat{U}(\tau_1,\tau_2)\hat{U}(\tau_2,\tau_3)=\hat{U}(\tau_1,\tau_3) \tag{2.2.4}$$

$$U(\tau_1,\tau_1)=1 \tag{2.2.5}$$

根据定义有

$$\begin{aligned}\hat{U}(\tau,0)&=\mathrm{e}^{\hat{K}_0\tau}\,\mathrm{e}^{-\hat{K}\tau}\\ \hat{U}(0,\tau)&=\mathrm{e}^{\hat{K}\tau}\mathrm{e}^{-\hat{K}_0\tau}\end{aligned} \tag{2.2.6}$$

$\hat{U}(0,\tau)$和$\hat{U}(\tau,0)$互为逆算符

$$\hat{U}(\tau,0)\hat{U}(0,\tau)=\hat{U}(0,\tau)\hat{U}(\tau,0)=1 \tag{2.2.7}$$

现在求$\hat{U}(\tau,0)$满足的方程．(2.2.6)式第一式两边对τ求微商得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{U}(\tau,0)&=\hat{K}_0\hat{U}(\tau,0)-\mathrm{e}^{\hat{K}_0\tau}\hat{K}\mathrm{e}^{-\hat{K}\tau}\\ &=\mathrm{e}^{\hat{K}_0\tau}[\hat{K}_0-\hat{K}]\,\mathrm{e}^{-\hat{K}_0\tau}\hat{U}(\tau,0)\\ &=-\hat{H}_1(\tau)\hat{U}(\tau,0)\end{aligned} \tag{2.2.8}$$

其中

$$\hat{H}_1(\tau)=\mathrm{e}^{\hat{K}_0\tau}\hat{H}_1\mathrm{e}^{-K_0\tau} \tag{2.2.9}$$

(2.2.8)式与$T=0\mathrm{K}$时$\hat{U}(t,t_0)$的方程很相似．考虑到边界条件$\hat{U}(0,0)=1$，(2.2.8)式可写为下面的积分方程

$$\hat{U}(\tau,\ 0)=1-\int_0^\tau \mathrm{d}\tau_1\hat{H}_1(\tau_1)\hat{U}(\tau_1,0) \tag{2.2.10}$$

此方程可用迭代的方法求解，将积分中各项的积分上限都变为τ后得到

$$\hat{U}(\tau,\ 0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\tau \mathrm{d}\tau_1\cdots\int_0^\tau \mathrm{d}\tau_n T_\tau[\hat{H}_1(\tau_1)\cdots\hat{H}_1(\tau_n)] \tag{2.2.11}$$

或写为

$$\hat{U}(\tau,0)=T_\tau\exp\left[-\int_0^\tau \hat{H}_1(\tau')\mathrm{d}\tau'\right]$$

最后求 $\mathrm{e}^{-\beta\Omega}$ 的表达式. 为此将(2.2.6)式写为

$$\mathrm{e}^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau}=\mathrm{e}^{-(\hat{H}_0-\mu N)\tau}\hat{U}(\tau,0) \qquad (2.2.12)$$

令 $\tau=\beta$, 对两边求迹, 并利用(2.2.11)式则得到 $\mathrm{e}^{-\beta\Omega}$ 的展开式如下

$$\mathrm{e}^{-\beta\Omega}=\mathrm{Tr}\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}=\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}U(\beta,0)]$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\cdots\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_n \mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}T_\tau[\hat{H}_1(\tau_1)\cdots\hat{H}_1(\tau_n)]\}$$

$$(2.2.13)$$

实际上这个方程很少用于作图形分析, 因为计算其相连图比较困难. 计算Ω时用的较多的是(2.1.27)式.

现在在相互作用绘景中写出松原函数. $\tau>\tau'$ 时有

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x\tau,x'\tau')=-\mathrm{e}^{\beta\Omega}\mathrm{Tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{\psi}_{k\alpha}(x\tau)\hat{\psi}^+_{k\beta}(x'\tau')\right\}$$

$$=-\mathrm{e}^{\beta\Omega}\mathrm{Tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}\hat{U}(\beta,0)[\hat{U}(0,\tau)\hat{\psi}_{\mathrm{I}\alpha}(x\tau)\hat{U}(\tau,0)]\right.$$
$$\left.\times[\hat{U}(0,\tau')\hat{\psi}^+_{\mathrm{I}\beta}(x'\tau')\hat{U}(\tau',0)]\right\}$$

$$=\frac{-\mathrm{Tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}\hat{U}(\beta,\tau)\hat{\psi}_{\mathrm{I}\alpha}(x\tau)\hat{U}(\tau,\tau')\hat{\psi}^+_{\mathrm{I}\beta}(x'\tau')\hat{U}(\tau',0)\right\}}{\mathrm{Tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}\hat{U}(\beta,0)\right\}}$$

$$\tau>\tau' \qquad (2.2.14)$$

上式推导中用了(2.2.12)式. 对 $\tau<\tau'$ 经过类似的计算得到

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x\tau,x'\tau')$$

$$=\frac{\mp\mathrm{Tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}\hat{U}(\beta,\tau')\hat{\psi}^+_{\mathrm{I}\beta}(x'\tau')\hat{U}(\tau',\tau)\hat{\psi}_{\mathrm{I}\alpha}(x\tau)\hat{U}(\tau,0)\right\}}{\mathrm{Tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}\hat{U}(\beta,0)\right\}}$$

$$\tau<\tau' \qquad (2.2.15)$$

(2.2.14)式、(2.2.15)式可合写为

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}\tau,\boldsymbol{x}'\tau')$$

$$=\frac{-\mathrm{Tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}\mathrm{T}_\tau[\hat{\psi}_{\mathrm{I}\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)\hat{\psi}^+_{\mathrm{I}\beta}(\boldsymbol{x}'\tau')\hat{U}(\beta,\ 0)]\right\}}{\mathrm{Tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}\hat{U}(\beta,0)\right\}}\quad(2.2.16)$$

引入符号

$$\langle\cdots\rangle_0=\mathrm{Tr}\left\{\mathrm{e}^{\beta(\Omega_0-\hat{H}_0+\mu\hat{N})}\cdots\right\}\quad(2.2.17)$$

则(2.2.16)式可写为

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}\tau,\ \boldsymbol{x}'\tau')=\frac{-\langle\mathrm{T}_\tau[\hat{\psi}_{\mathrm{I}\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)\hat{\psi}^+_{\mathrm{I}\beta}(\boldsymbol{x}'\tau')\hat{U}(\beta,\ 0)]\rangle_0}{\langle\hat{U}(\beta,0)\rangle_0}$$

$$(2.2.18)$$

(2.2.18)式与(1.4.1) 式的形式非常相似. 要计算这些级数需要计算若干场算符编时乘积的系综平均.

二、Wick 定理

将(2.2.11)式(取 $\tau=\beta$)代入(2.2.18)式得到

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}\tau,\ \boldsymbol{x}'\tau')=-\frac{1}{\langle\hat{U}(\beta,\ 0)\rangle_0}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta\mathrm{d}\tau_1\cdots\int_0^\beta\mathrm{d}\tau_n$$

$$\times\langle T_\tau[\hat{\psi}_{\mathrm{I}\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)\hat{\psi}^+_{\mathrm{I}\beta}(\boldsymbol{x}'\tau')\hat{H}_1(\tau_1)\cdots\hat{H}_1(\tau_n)]\rangle_0$$

这个展开式与零温格林函数的展开式非常相似. 展开的第一项正是 $\mathscr{G}^0(1,\ 2)$. 在一切实际问题中 $\hat{H}_1(\tau)$ 都是若干算符 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x}\tau)$、$\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}\tau)$ 的乘积对空间变量的积分. 用微扰论计算松原函数的问题归结为计算若干个取不同空间和“时间”点的算符 T_τ 乘积的平均值. $T=0$K 时 Wich 定理使微扰展开大大简化，正规乘积的基态期望值等于零使 G 只包含完全收缩项. 这样的简化在 $T>0$ 时并不存在，因为正规乘积的系综平均在 $T>0$ 时并不等于零. 然而仍存在一种广义的 Wick 定理，使我们可以计算松原函数的展开级数. 这是 Matsubara 首先证明的. 这个广义的 Wick 定理处

理算符的系综平均，它与统计算符 $e^{-\beta \hat{K}_0}$ 的形式有关，这一点与原来的 Wick 定理不同．原来的 Wick 定理是一个算符恒等式，它对于任何矩阵元都成立．

虽然一般情况下未微扰系统是均匀的，但有时也遇到非均匀的情况，因此我们取相互作用绘景中的单粒子基为$\{\varphi_j^0(\boldsymbol{x})\}$，将场算符展开为

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \sum \varphi_j^0(\boldsymbol{x}) C_j \tag{2.2.19}$$

$$\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}) = \sum_j \varphi_j^0(\boldsymbol{x})^* C_j^+ \tag{2.2.20}$$

函数 φ_j^0 满足本征值方程

$$\hat{K}_0 \varphi_j^0(\boldsymbol{x}) = (\varepsilon_k^0 - \mu)\varphi_j^0(\boldsymbol{x}) \tag{2.2.21}$$

j 代表自旋和空间量子数．令

$$e_j \equiv \varepsilon_j^0 - \mu \tag{2.2.22}$$

则相互作用绘景中的场算符是

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{x}\tau) &= \sum_j \varphi_j^0(\boldsymbol{x}) C_j e^{-e_j \tau} \\ \hat{\psi}_{\mathrm{I}}^+(\boldsymbol{x}\tau) &= \sum_j \varphi_j^0(\boldsymbol{x})^* C_j^+ e^{e_j \tau} \end{aligned} \tag{2.2.23}$$

自由粒子松原函数可求出为

$$\begin{aligned} &\mathscr{G}^0(\boldsymbol{x}\tau, \boldsymbol{x}'\tau') \\ &= -\sum_j \varphi_j^0(\boldsymbol{x}) \varphi_j^0(\boldsymbol{x})^* e^{-e_j(\tau-\tau')} \begin{cases} 1 \pm n_j^0, & \tau > \tau' \\ \pm n_j^0, & \tau < \tau' \end{cases} \end{aligned} \tag{2.2.24}$$

其中

$$n_j^0 = e^{\beta \Omega_0} \mathrm{Tr}(e^{-\beta \hat{K}_0} C_j^+ C_j) = (e^{\beta e_j} \mp 1)^{-1} \tag{2.2.25}$$

微扰论级数的一般项包含下面的因子

$$\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_0 T_\tau[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}]\}\equiv\langle T_\tau[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}]\rangle_0 \tag{2.2.26}$$

其中 $\hat{A}$、$\hat{B}$、$\hat{C}$、$\cdots\hat{F}$ 是相互作用绘景中的场算符．每一个场算符有自己的“时间”τ. $\hat{\rho}_0$ 的公式是

$$\hat{\rho}_0=\mathrm{e}^{\beta(\Omega_0-\hat{K}_0)} \tag{2.2.27}$$

定义收缩

$$\hat{A}^{\bullet}\hat{B}^{\bullet}=\langle T_\tau[\hat{A}\hat{B}]\rangle_0=\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_0 T_\tau[\hat{A}\hat{B}]\} \tag{2.2.28}$$

例如

$$\hat{\psi}_{\mathrm{I}\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)^{\bullet}\,\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{I}\beta}(\boldsymbol{x}'\tau')^{\bullet}=-\mathscr{G}^{0}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}\tau,\boldsymbol{x}'\tau') \tag{2.2.29}$$

广义 Wick 定理可以表述为

$$\langle T_\tau[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}]\rangle_0=[\hat{A}^{\bullet}\hat{B}^{\bullet}\hat{C}^{\bullet\bullet}\cdots\hat{F}^{\bullet\bullet\bullet}]+[\hat{A}^{\bullet}\hat{B}^{\bullet\bullet}\hat{C}^{\bullet}\cdots\hat{F}^{\bullet\bullet\bullet}]+\cdots \tag{2.2.30}$$

其中

$$[\hat{A}^{\bullet}\hat{B}^{\bullet}\hat{C}^{\bullet}\cdots F^{\bullet\bullet\bullet}]=\pm[\hat{A}^{\bullet}\hat{C}^{\bullet}\hat{B}^{\bullet\bullet}\cdots\hat{F}^{\bullet\bullet\bullet}] \tag{2.2.31}$$

假定算符已编好次序．若未编好，可在(2.2.30)式两边同时调动算符，结果并不引入附加的符号．我们需要证明下面的等式

$$\langle\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}\rangle_0=[\hat{A}^{\bullet}B^{\bullet}C^{\bullet\bullet}\cdots F^{\bullet\bullet\bullet}]+[\hat{A}^{\bullet}\hat{B}^{\bullet\bullet}\hat{C}^{\bullet}\cdots F^{\bullet\bullet\bullet}]+\cdots \tag{2.2.32}$$

已假定上式中 $\tau_A>\tau_B>\tau_C>\cdots>\tau_F$，因而略去了(2.2.30)式中的编时符号 T_τ．现在引入相互作用绘景中算符的一般表示．将(2.2.19)式、(2.2.20)式写为

$$\hat{\psi}_{\mathrm{I}}\quad 或\ \hat{\psi}^{+}_{\mathrm{I}}=\sum_j \chi_j(\boldsymbol{x}\tau)\alpha_j \tag{2.2.33}$$

α_j 代表 C_j 或 C^{+}_j．$\chi_j(\boldsymbol{x}\tau)$ 代表 $\varphi^0_j(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-e_j\tau}$ 或 $\varphi^0_j(\boldsymbol{x})^*\mathrm{e}^{e_j\tau}$．用这个简化表示，(2.2.32)式的左边可写为

$$\begin{aligned}&\langle\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}\rangle_0\\&=\sum_a\sum_b\sum_c\cdots\sum_f\chi_a\chi_b\chi_c\cdots\chi_f\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f)\end{aligned} \tag{2.2.34}$$

因为 $\hat{K}_0$ 和 $\hat{N}$ 是对易的，只当 $\{\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f\}$ 中包含相等数目的产生

算符和消灭算符时 $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f)$ 才不等于零．因此算符的总数必须是偶数．我们遇到的实际情况也正是这样．

现在将 α_a 移到右边．利用对易关系可得

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f)\\
&\quad=\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0[\alpha_a,\alpha_b]_{\mp}\alpha_c\cdots\alpha_f)\pm\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_b\alpha_a\alpha_c\cdots\alpha_f)\\
&\quad=\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0[\alpha_a,\alpha_b]_{\mp}\alpha_c\cdots\alpha_f)\pm\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_b[\alpha_a,\alpha_c]_{\mp}\cdots\alpha_f)\\
&\qquad+(\pm)^2\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_b\alpha_c\alpha_a\cdots\alpha_f)\\
&\quad=\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0[\alpha_a,\alpha_b]_{\mp}\alpha_c\cdots\alpha_f)\pm\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_b[\alpha_a,\alpha_c]_{\mp}\cdots\alpha_f)\\
&\qquad+\cdots+\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_b\alpha_c\cdots[\alpha_a,\alpha_f]_{\mp})\pm\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f\alpha_a)
\end{aligned}
\tag{2.2.35}
$$

与前相同，等式右边上面的符号对应玻色子，下面的符号对应费密子．$[\alpha_a,\alpha_b]_{\mp}=1,0,-1$，是一个数，可以提出来．$[\alpha_a,\alpha_b]_{\mp}$ 的取值依 α_a、α_b 是什么算符而定．还可证明

$$
\mathrm{e}^{\beta\hat{K}_0}\alpha_a\mathrm{e}^{-\beta\hat{K}_0}=\alpha_a\mathrm{e}^{\lambda_a\beta e_a}
\tag{2.2.36}
$$

如果 α_a 是产生算符则 $\lambda_a=1$，如果 α_a 是消灭算符则 $\lambda_a=-1$．(2.2.36)式与下列方程等价

$$
\alpha_a\hat{\rho}_0=\hat{\rho}_0\alpha_a\mathrm{e}^{\lambda_a\beta e_a}
\tag{2.2.37}
$$

用求迹号下算符的循环不变性质可将(2.2.35)式最后一项写为

$$
\pm\mathrm{Tr}(\alpha_a\hat{\rho}_0\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f)=\pm\mathrm{e}^{\lambda_a\beta e_a}\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f)
\tag{2.2.38}
$$

这样，由(2.2.35)式、(2.2.38)式我们得到下面的重要结果

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_0\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f]&=\frac{[\alpha_a,\alpha_b]_{\mp}}{1\mp\mathrm{e}^{\lambda_a\beta e_a}}\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_0\alpha_c\cdots\alpha_f]\\
&\pm\frac{[\alpha_a,\alpha_c]_{\mp}}{1\mp e^{\lambda_a\beta e_a}}\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_b\cdots\alpha_f)+\cdots+\frac{[\alpha_a,\alpha_f]_{\mp}}{1\mp e^{\lambda_a\beta e_a}}\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_b\alpha_c\cdots)
\end{aligned}
\tag{2.2.39}
$$

定义两个算符的收缩为

$$
\alpha_a^{\cdot}\alpha_b^{\cdot}=\frac{[\alpha_a,\alpha_b]_{\mp}}{1\mp\mathrm{e}^{\lambda_a\beta e_a}}
\tag{2.2.40}
$$

则(2.2.39)式可写为以下的形式

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_a\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f)=\alpha_a^{\cdot}\alpha_b^{\cdot}\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_c\cdots\alpha_f)\\
&\pm\alpha_a^{\cdot}\alpha_c^{\cdot}\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_b\cdots\alpha_f)+\cdots+\alpha_a^{\cdot}\alpha_f^{\cdot}\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_b\alpha_c\cdots)\\
&=\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_a^{\cdot}\alpha_b^{\cdot}\alpha_c\cdots\alpha_f)+\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_a^{\cdot}\alpha_b\alpha_c^{\cdot}\cdots\alpha_f)\\
&\quad+\cdots+\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0\alpha_a^{\cdot}\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f^{\cdot})
\end{aligned}
\tag{2.2.41}
$$

此式包含了有收缩的算符表示式的求迹的定义．实际上好多项等于零，不等零的收缩只有

$$
\begin{aligned}
C_j^{+\cdot}C_j^{\cdot}&=\frac{[C_j^+,\ C_j]_{\mp}}{1\mp\mathrm{e}^{\beta e_j}}=\frac{\mp 1}{1\mp\mathrm{e}^{\beta e_j}}\\
&=\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta e_j}\mp 1}=n_j^0=\langle C_j^+C_j\rangle_0
\end{aligned}
\tag{2.2.42}
$$

$$
C_j^{\cdot}C_j^{+\cdot}=1\pm n_j^0=\langle C_jC_j^+\rangle_0 \tag{2.2.43}
$$

这两个收缩也等于相同算符的系综平均，一般说来我们有

$$
\alpha_a^{\cdot}\alpha_b^{\cdot}=\langle\alpha_a\alpha_b\rangle_0=\langle T_\tau[\alpha_a\alpha_b]\rangle_0 \tag{2.2.44}
$$

因为 $\tau_A>\tau_B>\tau_C>\cdots>\tau_F$ 由(2.2.34)式、(2.2.31)式我们得到

$$
\begin{aligned}
&\langle\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}\rangle_0\\
&=\sum_a\sum_b\sum_c\cdots\sum_f\chi_a\chi_b\chi_c\cdots\chi_f\{\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_0\alpha_a^{\cdot}\alpha_b^{\cdot}\alpha_c\cdots\alpha_f]\\
&\quad+\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_0\alpha_a^{\cdot}\alpha_b\alpha_c^{\cdot}\cdots\alpha_f]+\cdots+\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_0\alpha_a^{\cdot}\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f^{\cdot}]\}\\
&=\langle\hat{A}^{\cdot}\hat{B}^{\cdot}C\cdots\hat{F}\rangle_0+\langle\hat{A}^{\cdot}\hat{B}\hat{C}^{\cdot}\cdots\hat{F}\rangle_0+\cdots+\langle\hat{A}^{\cdot}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}^{\cdot}\rangle_0
\end{aligned}
\tag{2.2.45}
$$

收缩是一个常数可以提到 Tr 符号的外面．剩下的结构和原来的相似．重复以上方法就可证明

$$
\langle\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{F}\rangle_0=\langle\hat{A}^{\cdot}\hat{B}^{\cdot}\hat{C}^{\cdot\cdot}\cdots\hat{F}^{\cdot\cdot\cdot}\rangle_0+\langle\hat{A}^{\cdot}\hat{B}^{\cdot\cdot}\hat{C}^{\cdot}\cdots\hat{F}^{\cdot\cdot\cdot}\rangle_0+\cdots \tag{2.2.46}
$$

已假定 $\tau_A>\tau_B>\tau_C>\cdots>\tau_F$，故左边可写为$\langle T_\tau[\hat{A}\hat{B}\hat{G}\cdots\hat{F}]\rangle_0$.
这就证明了定理(2.2.30)式.

有限温度 Wick 定理的形式是很普遍的．对外势场作用下的

有限系统和无限的平移不变系统都是适用的．其唯一的假定是存在不依赖于时间的单粒子哈密顿量 $\hat{H}_0$，它决定统计算符 $e^{\beta(\Omega_0-\hat{K}_0)}$．广义 Wick 定理使我们能够研究处于热力学平衡态的任意相互作用系统．

§ 2.3 图解法的基本规则

由§2.2节的分析可以看出，松原函数的微扰级数与零温格林函数的微扰级数是相似的，主要的差别是用 $\mathscr{G}^0$ 代替 G^0，"时间"τ 的积分区间是$(0,\beta)$．作为具体的例子考虑下式

$$\langle T_\tau[\hat{\psi}_\alpha(1)\hat{\psi}_\beta(2)\hat{\psi}^+_{\beta'}(2')\hat{\psi}^+_{\alpha'}(1')]\rangle_0$$

数字"1"代表$(\boldsymbol{x}_1,\tau_1)$．场算符的表示相互作用绘景的角标 I 已经略去，因为所有的微扰展开都是在相互作用绘景中进行的．上式中场算符有两种不同方式的收缩，

$$\begin{aligned}&\langle T_\tau[\hat{\psi}_\alpha(1)\hat{\psi}_\beta(2)\hat{\psi}^+_{\beta'}(2')\hat{\psi}^+_{\alpha'}(1')]\rangle_0\\=&\langle \hat{\psi}_\alpha(1)^{\cdot}\hat{\psi}_\beta(2)^{\cdot\cdot}\hat{\psi}^+_{\beta'}(2')^{\cdot\cdot}\hat{\psi}^+_{\alpha'}(1')^{\cdot}\rangle_0\\&\qquad+\langle \hat{\psi}_\alpha(1)^{\cdot}\hat{\psi}_\beta(2)^{\cdot\cdot}\hat{\psi}^+_{\beta'}(2')^{\cdot}\hat{\psi}^+_{\alpha'}(1')^{\cdot\cdot}\rangle_0\\&=\mathscr{G}^0_{\alpha\alpha'}(1,1')\mathscr{G}^0_{\beta\beta'}(2,2')\pm\mathscr{G}^0_{\alpha\beta'}(1,2')\mathscr{G}^0_{\beta\alpha'}(2,1')\end{aligned}$$

对(2.2.18)式分子中的每一项都可以作类似的分析．因为有限温度 Wick 定理的代数结构与(1.4.26)式中完全收缩项的代数结构完全相同，所以松原函数与零温格林函数有相同的费曼图，也可分为相连图和不相连图，$\mathscr{G}_{\alpha\beta}$ 表达式的分母准确地抵消了不相连图．松原函数的微扰级数可写为下面的形式

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(1,2)=-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta d\tau_1'\cdots\int_0^\beta d\tau_n'\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_0T_\tau[\hat{H}_1(\tau_1')\cdots\hat{H}_1(\tau_n')\hat{\psi}_\alpha(1)\hat{\psi}_\beta(2)]\}_c \qquad (2.3.1)$$

角标"c"表示只包含相连图．

任何图形的主要元素都是代表自由粒子松原函数的线和表示相互作用势的线．与第一章一样，用带方向的实线代表松原函数，箭头的方向从$\mathscr{G}^0(1,2)$的第二个变量指向第一个变量．波纹线代表势．对各线的交点（“顶点”）的坐标进行积分，对 $\boldsymbol{x}$ 的积分为整个空间，对 τ 的积分从 0 到 β．在顶角还对自旋变量求和．图形的具体形式取决于粒子间相互作用的类型．

费曼图形的分析及规则的推导与零温格林函数相同，所以下面只介绍最后的结果．

一、坐标空间的费曼图

以双粒子相互作用为例，$\hat{H}_1$ 的公式是

$$\hat{H}_1=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x}_1)\hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}_2)V(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}_2)\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}_1) \tag{2.3.2}$$

已假定$V(\boldsymbol{x})$与自旋无关．在相互作用绘景中

$$\begin{aligned}\hat{H}_1(\tau_1)&=\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x}_1\tau_1)\hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}_2\tau_1)V(\boldsymbol{x}_1-\\&\qquad\boldsymbol{x}_2)\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}_2\tau_1)\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}_1\tau_1)\\&=\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3x_1\,\mathrm{d}^3x_2\int_0^\beta\mathrm{d}\tau_2\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x}_1\tau_1)\hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}_2\tau_2)\\&\qquad V_0(\boldsymbol{x}_1\tau_1,x_2\tau_2)\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}_2\tau_2)\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}_1\tau_1)\end{aligned} \tag{2.3.3}$$

其中

$$V_0(x_1\tau_1,\boldsymbol{x}_2\tau_2)=V(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)\delta(\tau_1-\tau_2) \tag{2.3.4}$$

微扰展开与零温格林函数包含相同的费曼图．求 n 级贡献的规则如下：

a. 画出有 n 条相互作用线、$(2n+1)$条粒子线的所有拓朴不等价图．

b. 每条粒子线代表 $\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(1,2)$，方向从 2 到 1．

c. 相互作用势用波纹线表示.

d. 对所有的内部变量积分.

e. 对内自旋变量求和.

f. 乘以因子$(-1)^n(-1)^F$，F 为封闭费密环的数目.

g. $\mathscr{G}$的两个时间变量相等时解释为

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{x}_i\tau_i,\ \boldsymbol{x}_j\tau_i)=\lim_{\tau_j\to\tau^+_i}\mathscr{G}(\boldsymbol{x}_i\tau_i,\ \boldsymbol{x}_j\tau_j) \tag{2.3.5}$$

作为例子，考虑图2.1所示的零级项与一级项.

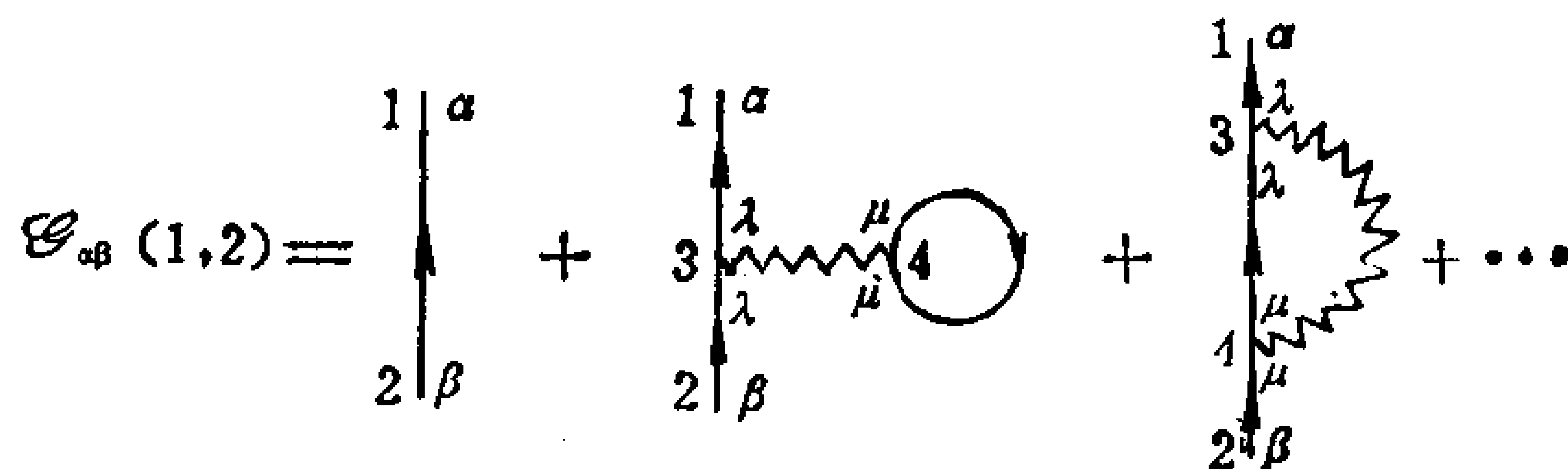


图 2.1

根据上述规则，此图的贡献为

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(1,2)=\mathscr{G}^0_{\alpha\beta}(1,2)$$

$$-\int d^3x_3d^3x_4\int_0^\beta d\tau_3d\tau_4[\pm\mathscr{G}^0_{\alpha\lambda}(1,3)\mathscr{G}^0_{\lambda\beta}(3,2)\mathscr{G}^0_{\mu\mu}(4,4)V_0(3,\ 4)$$

$$+\mathscr{G}^0_{\alpha\lambda}(1,3)\mathscr{G}^0_{\lambda\mu}(3,4)\mathscr{G}^0_{\mu\beta}(4,2)V_0(3,4)]+\cdots \tag{2.3.6}$$

因为相互作用与自旋无关，所以$\mathscr{G}$是对角的，$\mathscr{G}_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}\mathscr{G}_0$ 对自旋求和后上式变为

$$\mathscr{G}(1,2)=\mathscr{G}^0(1,2)-$$

$$\int d^3x_3d^3x_4\int_0^\beta d\tau_3d\tau_4[\pm(2s+1)\mathscr{G}^0(1,3)\mathscr{G}^0(3,2)\mathscr{G}^0(4,4)V_0(3,4)$$

$$+\mathscr{G}^0(1,3)\mathscr{G}^0(3,4)\mathscr{G}^0(4,2)V_0(3,4)]+\cdots \tag{2.3.7}$$

$(2s+1)$ 是自旋为 s 的粒子的简并度. 像规则 g 解释的那样，$\mathscr{G}^0(4,\ 4)$解释为 $\mathscr{G}^0(4,\ 4^+)$，$\mathscr{G}^0(4,\ 4^+)$ 可以看作是广义的粒子密度.

$$\mathscr{G}^0(4,4^+)=\mp(2s+1)^{-1}\langle\hat{n}^0(\boldsymbol{x}_4)\rangle_0$$

它依赖于化学势 μ，因而不同于未微扰的粒子密度．因为 μ 可能与自由粒子系统的化学势不同．

二、动量空间的费曼图

坐标空间中 $\mathscr{G}^0$ 是 τ 的不连续函数，$\mathscr{G}^0(i,\ j)$ 对 $\tau_i>\tau_j$ 和 $\tau_j>\tau_i$ 有不同的形式．所有对 τ 的积分事实上分为许多区间，其数目随微扰展开级数 n 的增加而迅速增大．进行具体计算时用坐标空间的图解法就很不方便．如果将与 τ 有关的量展成此变量的傅氏级数，整个方法可大为改进．

§2-1 节中已讨论过松原函数对“时间”变量 τ 的傅氏变换，其结果为

$$\mathscr{G}(\tau)=\frac{1}{\beta}\sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_n)$$

$$\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_n)=\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\mathscr{G}(\tau) \tag{2.3.8}$$

$$\omega_n=\begin{cases}(2n+1)\pi/\beta, & \text{费密子}\\ 2n\pi/\beta, & \text{玻色子}\end{cases}$$

相互作用势的展开为

$$V_0(\boldsymbol{x}\tau_1,\boldsymbol{x}_2\tau_2)=V(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)\delta(\tau_1-\tau_2)$$

$$=\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)-\omega_n(\tau_2-\tau_1)]}V_0(\boldsymbol{q},\ \omega_n) \tag{2.3.9}$$

$$V_0(\boldsymbol{q},\omega)=V(\boldsymbol{q})$$

推导(2.3.9)式时利用了下面的关系

$$\delta(\tau)=\frac{1}{\beta}\sum_{n(\text{偶数})}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n\tau}$$

对平移不变系统，$\mathscr{G}$ 只依赖于坐标差 $\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2$，这时松原函数的傅氏变换为

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x}\tau,\ \boldsymbol{x}'\tau')=\frac{1}{\beta}\sum_{n}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')-\omega_n(\tau-\tau')]}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega) \tag{2.3.10}$$

有了以上的关系，可以仿照§1.5中的方法将坐标空间的表达式变换到动量空间．变换时要用到下面的关系式

$$\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega_n-\omega'_n)\tau}=\beta\delta_{\omega_n,\omega'_n}, \tag{2.3.11}$$

它使每个顶角的频率守恒．

动量空间中计算松原函数 n 级修正项的规则如下：

a．画出有 n 条相互作用线和 $(2n+1)$ 条粒子线的所有拓朴不等价图．在每个顶角动量、频率守恒．

b．每条粒子线代表

$$\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k},\omega_n)=\frac{\delta_{\alpha\beta}}{\mathrm{i}\omega_n-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0+\mu}$$

c．相互作用势用波纹线代表，$V_0(\boldsymbol{k},\omega_n)=V(\boldsymbol{k})$．

d．对独立的内动量积分，对独立的内频率求和．

e．对内自旋求和．

f．乘以因子 $\left[\frac{-1}{(2\pi)^3\beta}\right]^n(-1)^F$．$F$ 是封闭费密环的数目．

g．当粒子线自己封闭或与同一相互作用线连接时乘以收敛因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\eta}$．

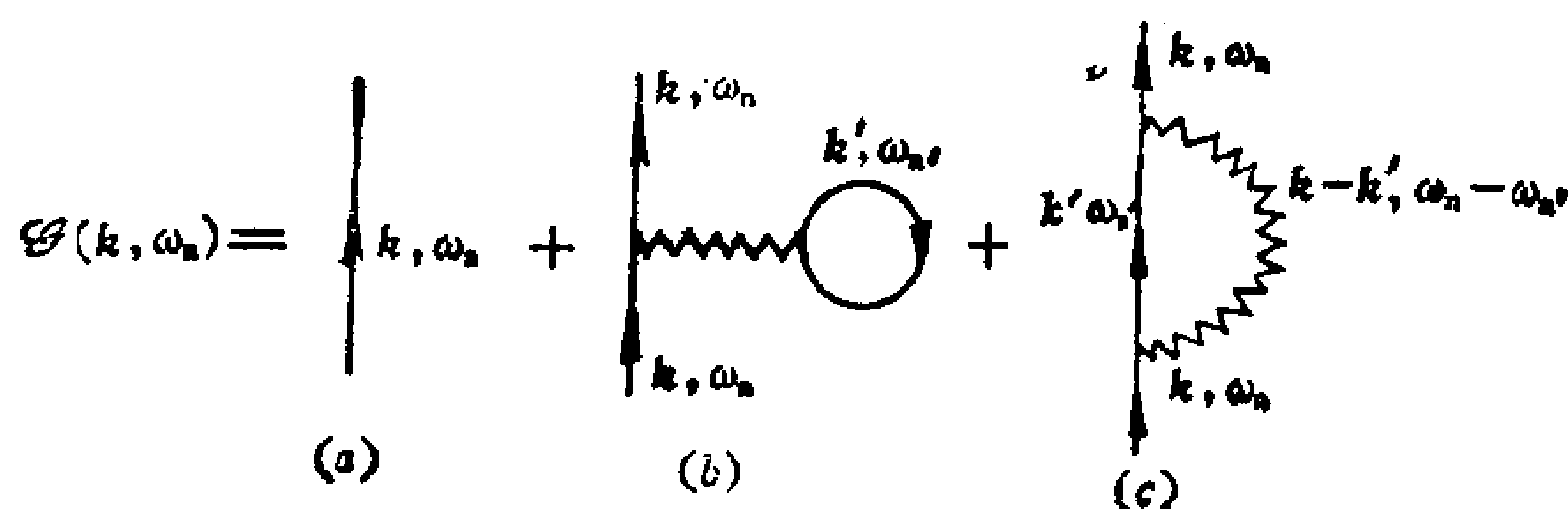


图 2.2

图 2.2 为$\mathscr{G}$的零级及一级近似费曼图. 其表达式为.

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)=\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k},\omega_n)-[\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k},\omega_n)]^2\frac{1}{\beta}\sum_{n'}e^{i\omega_{n'}\eta}$$

$$\times\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}[\pm(2s+1)]V(0)\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k}',\omega_{n'})$$

$$-[\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k},\omega_n)]^2\frac{1}{\beta}\sum_{n'}e^{i\omega_{n'}\eta}$$

$$\times\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k}',\omega_{n'})+\cdots \quad (2.3.12)$$

动量空间中热力学函数的公式变为

$$N=\mp V\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_n e^{i\omega_n\eta}\mathrm{Tr}\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n) \quad (2.3.13)$$

$$E=\langle\hat{H}\rangle=\mp V\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_n e^{i\omega_n\eta}\frac{1}{2}(i\omega_n$$

$$+\varepsilon_k^0+\mu)\mathrm{Tr}\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n) \quad (2.3.14)$$

$$\Omega=\Omega_0\mp V\int\frac{d\lambda}{\lambda}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_n e^{i\omega_n\eta}\frac{1}{2}(i\omega_n$$

$$-\varepsilon_k^0+\mu)\mathrm{Tr}\mathscr{G}^\lambda(\boldsymbol{k},\omega_n) \quad (2.3.15)$$

其中 Tr 是对自旋坐标矩阵求迹.

三、频率求和

松原函数的微扰展开中出现对频率的求和。常遇到的有下面的形式

$$\frac{1}{\beta}\sum_n e^{i\omega_n\eta}\frac{1}{i\omega_n-\varepsilon_k^0+\mu} \quad (2.3.16)$$

先讨论玻色子的情况，这时 $\omega_n=2n\pi/\beta$. 将求和写为

$$\sum_n\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n-x} \quad (2.3.17)$$

其中 $e^{i\omega_n\eta}$ 对保证级数收敛是很重要的. 没有它级数将对数发散.

最简单的方法是将求和用回路积分表示。这需要一个半纯函数，它的极点出现在 $n=$ 偶数的地方. 一个可能的选择是 $\beta(e^{\beta z}-1)^{-1}$. 它的极点出现在 $z=2n\pi i/\beta=i\omega_n$， 而留数等于 1.

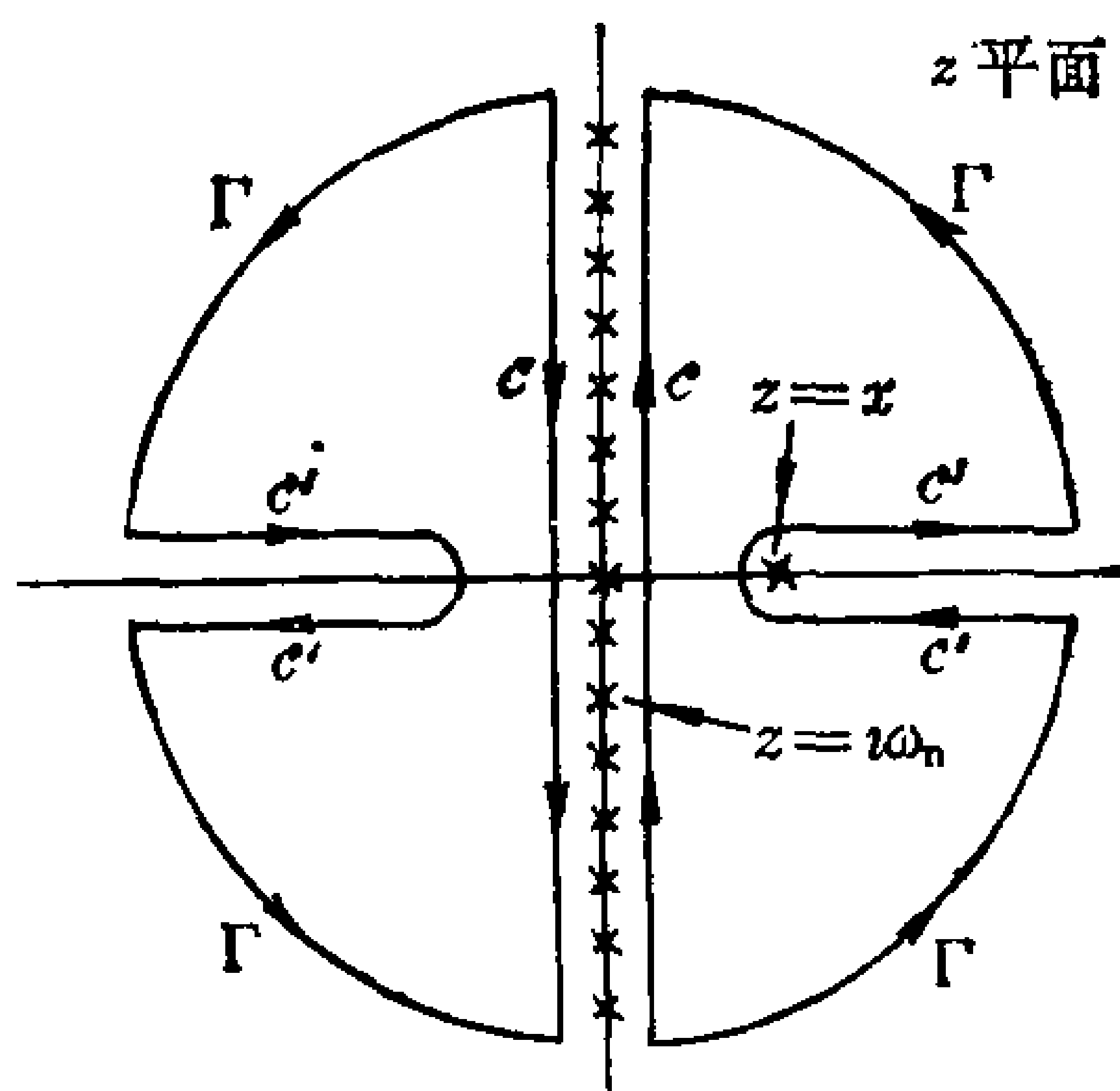


图 2.3

如果回路 C 包围虚轴如图 2·3 所示，则由回路积分

$$\frac{\beta}{2\pi i}\int\frac{dz}{e^{\beta z}-1}\,\frac{e^{\eta z}}{z-x} \tag{2.3.18}$$

可准确地得出(2.3.17)式的和，因为被积函数单极点$i\omega_n$的留数是 $\beta^{-1}e^{i\omega\eta}(i\omega_n-x)^{-1}$，而 $i\omega_n$ 有一个无限的序列. 将积分回路形变到 C' 和 Γ 如图所示. $\mathrm{Re}z>0$、z 沿径向趋于无穷时，被积函数的数量级为 $|z|^{-1}\exp[-(\beta-\eta)\mathrm{Re}z]$. $\mathrm{Re}z<0$、$|z|\to\infty$ 时被积函数的数量级为 $|z|^{-1}\exp(\eta\mathrm{Re}z)$. 因为 $\beta>\eta>0$，由 Jordan 引理可知大圆弧 Γ 对积分的贡献等于零. 只剩下沿 C' 的积分，所以

$$\sum_n\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n-x}=\frac{\beta}{2\pi i}\int_{C'}\frac{dz}{e^{\beta z}-1}\,\frac{e^{\eta z}}{z-x} \tag{2.3.19}$$

C' 中的极点是 $z=x$ 的单极点. 由 Cauchy 定理得到

$$\lim_{\eta\to 0}\sum_{n(偶数)}\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n-x}=\frac{-\beta}{e^{\beta x}-1} \tag{2.3.20}$$

负号是由 C' 的方向引起的. 上式最后已取 $\eta\to 0$.

对费密子可作类似的分析. 这时 $\omega_n=(2n+1)\pi/\beta$. 函数 $-\beta(\mathrm{e}^{\beta z}+1)^{-1}$ 当 $z=\mathrm{i}\omega_n$ 时有单极点, 其留数等于 1. 因此级数可以写为

$$\sum_{n(\text{奇数})}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\eta}}{\mathrm{i}\,\omega_n-x}=\frac{-\beta}{2\pi\,\mathrm{i}}\int_C\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{e}^{\beta z}+1}\frac{\mathrm{e}^{\eta z}}{z-x}\tag{2.3.21}$$

回路 C 示于图 2-3 中. 由 Jordan 引理, 因为 $\beta>\eta>0$, 可将 C 形变到 C', $z=x$ 处的单极点给出

$$\lim_{\eta\to 0}\sum_{n(\text{奇数})}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\eta}}{\mathrm{i}\omega_n-x}=\frac{\beta}{\mathrm{e}^{\beta x}+1}\tag{2.3.22}$$

两种情况可写为一个简单的公式

$$\lim_{\eta\to 0}\sum_{n}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\eta}}{\mathrm{i}\omega_n-x}=\frac{\mp\beta}{\mathrm{e}^{\beta x}\mp 1}\tag{2.3.23}$$

以上结果可以推广到较一般的情况. 设 $F(\mathrm{i}\omega_n)$ 是一个复变函数. 若 $\omega_n=(2n+1)\pi/\beta$, 则有以下的 Poisson 求和公式

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}F(\mathrm{i}\omega_n)=-\frac{\beta}{2\pi\mathrm{i}}\int_C\frac{F(z)}{\mathrm{e}^{\beta z}+1}\mathrm{d}z$$

$$=\frac{\beta}{2\pi\mathrm{i}}\int_C\frac{F(z)}{\mathrm{e}^{-\beta z}+1}\mathrm{d}z\tag{2.3.24}$$

积分回路 c 围绕整个虚 z 轴如图 2.4 所示, 但不包括 $F(z)$ 的任何其它极点. (2.3.24)式可用 Càuchy 定理证明. 对 $\omega_n=2n\pi/\beta$, 有公式

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}F(\mathrm{i}\omega_n)=\frac{\beta}{2\pi\mathrm{i}}\int_C\frac{F(z)}{\mathrm{e}^{\beta z}-1}\mathrm{d}z=-\frac{\beta}{2\pi\mathrm{i}}\int\frac{F(z)\,\mathrm{d}z}{\mathrm{e}^{-\beta z}+1}\tag{2.3.25}$$

具体计算技巧与前面的讨论相同

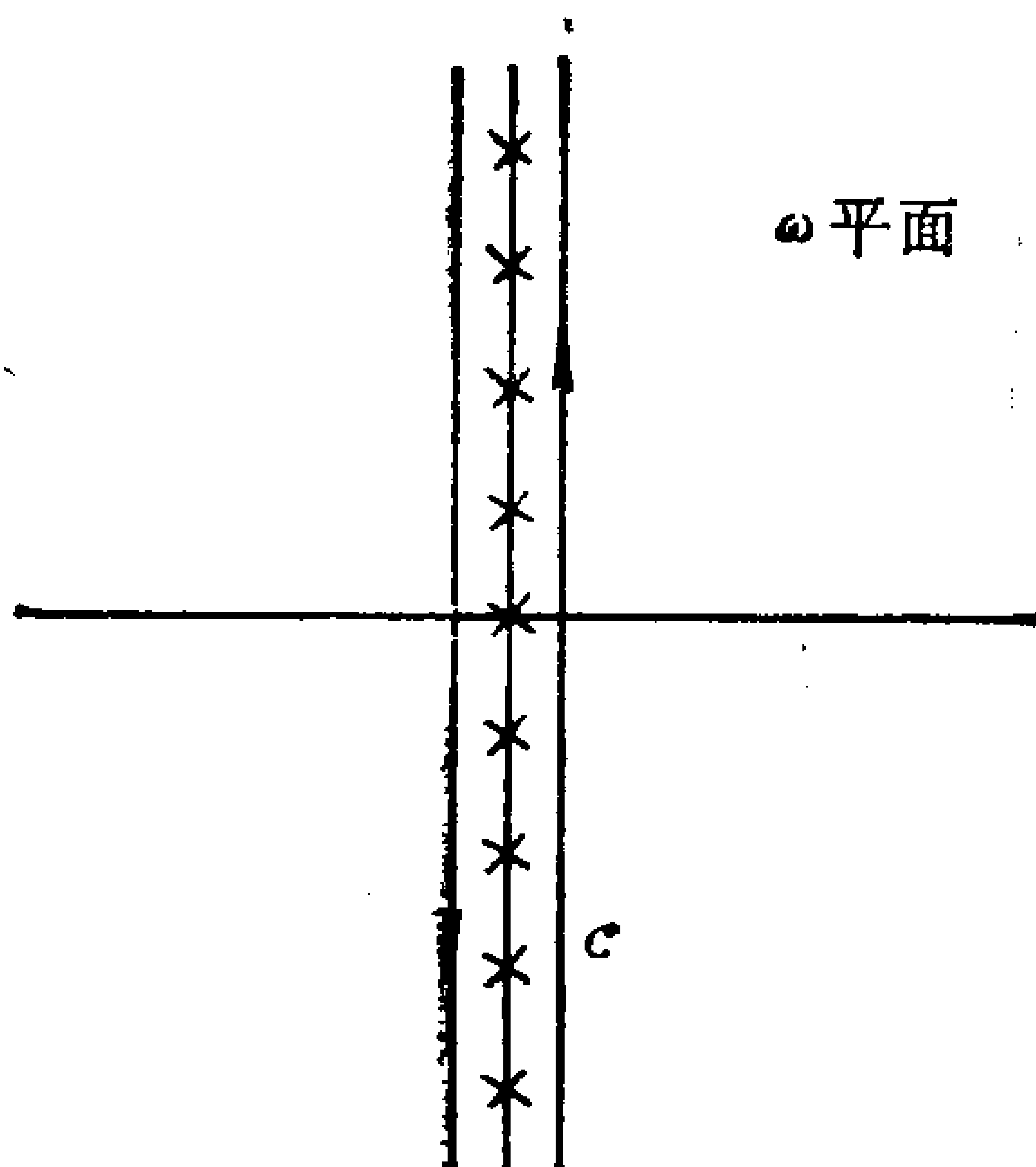


图 2.4

§2.4 Dyson 方 程

温度格林函数的费曼图和零温格林函数是相同的,因此Dyson方程也有相同的形式. 坐标空间中松原函数可写为($\mathscr{G}$. $\mathscr{G}^0$, Σ是自旋角标的矩阵)

$$\mathscr{G}(1,2)=\mathscr{G}^0(1,2)+\int d3d4\mathscr{G}^0(1,3)\Sigma(3,4)\mathscr{G}^0(4,2) \tag{2.4.1}$$

对 τ 的积分是从 0 到 β. 方程(2.4.1)中的Σ可看作自能的定义. 与前相同,可定义本征自能部分,它不能由切断一根 $\mathscr{G}^0$ 线而分为两部分. 以 Σ^* 代表所有本征自能的和,则 Σ 可写为

$$\Sigma(1,2)=\Sigma^*(1,2)+\int d3d4\Sigma^*(1,3)\mathscr{G}^0(3,4)\Sigma^*(4,2)+\cdots \tag{2.4.2}$$

Dyson 方程可写为

$$\mathscr{G}(1,2)=\mathscr{G}^0(1,2)+\int d3d4\,\mathscr{G}^0(1,3)\Sigma^*(3,4)\mathscr{G}(4,2) \tag{2.4.3}$$

若哈密顿量与时间无关，且系统是空间均匀的，则 Dyson 方程可以化简．变换到动量空间有

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)=\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k},\omega_n)+\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k},\omega_n)\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega_n)\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n) \quad (2.4.4)$$

假定此式中的量对自旋变量是对角的，则可以解出

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)=\frac{1}{[\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k},\omega_n)]^{-1}-\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega_n)} \quad (2.4.5)$$

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega_n)=\frac{\delta_{\alpha\beta}}{\mathrm{i}\omega_n-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu)-\Sigma^*(\boldsymbol{k},\ \omega_n)}$$

这个方程与(1.6.9)式非常相似，但 ω_n 是分立变量．

用 Dyson 方程可将热力学函数的公式简化为

$$N(T,V,\mu)=\mp V(2s+1)\frac{1}{\beta}\sum_n\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\times\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\eta}}{\mathrm{i}\omega_n-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu)-\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega_n)} \quad (2.4.6)$$

$$E(T,V,\mu)=\mp V(2s+1)\frac{1}{\beta}\sum_n\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\eta}\times\left[\frac{1}{2}+\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0+\frac{1}{2}\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega_n)}{\mathrm{i}\omega_n-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu)-\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega_n)}\right] \quad (2.4.7)$$

$$\Omega(T,V,\mu)=\Omega_0(T,V,\mu)\mp V(2s+1)\int_0^1\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\frac{1}{\beta}\sum_n\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\eta}\times\left[\frac{1}{2}+\frac{\frac{1}{2}\Sigma^{*\lambda}(\boldsymbol{k},\omega_n)}{\mathrm{i}\omega_n-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu)-\Sigma^{*\lambda}(\boldsymbol{k},\omega_n)}\right] \quad (2.4.8)$$

公式中的收敛因子起重要的作用，利用它还可消去常数项．考虑玻色子的情况，

$$
\begin{aligned}
\sum_n e^{i\omega_n\eta} &= \sum_n e^{2\pi i n\eta/\beta} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}(e^{2\pi i\eta/\beta})^n + \sum_{n=0}^{\infty}(e^{2\pi i\eta/\beta})^{-n} - 1 \\
&= (1-e^{2\pi i\eta/\beta})^{-1} + (1-e^{-2\pi i\eta/\beta})^{-1} - 1 \\
&= 0 \qquad (2.4.9)
\end{aligned}
$$

费密子求和与此式的差别在于有因子 $e^{\pi i\eta/\beta}$. 这样我们得到

$$
\begin{aligned}
E = \mp V(2s+1)\frac{1}{\beta}\sum_n\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}e^{i\omega_n\eta}[\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0 \\
+\frac{1}{2}\sum{}^*(\boldsymbol{k},\omega_n)]\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n) \qquad (2.4.10)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Omega = \Omega_0 \mp V(2s+1)\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\frac{1}{\beta}\sum_n\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}e^{i\omega_n\eta} \\
\times\frac{1}{2}\sum{}^{*\lambda}(\boldsymbol{k},\omega_n)\mathscr{G}^\lambda(\boldsymbol{k},\omega_n) \qquad (2.4.11)
\end{aligned}
$$

同样，我们可以引入有效势 V 和极化部分 Π 的概念. 对均匀系有

$$
V(\boldsymbol{q},\omega_n) = V_0(\boldsymbol{q},\omega_n) + V_0(\boldsymbol{q},\omega_n)\Pi(\boldsymbol{q},\omega_n)V_0(\boldsymbol{q},\omega_n) \qquad (2.4.12)
$$

引入正规极化部分 $\Pi^*(\boldsymbol{q},\omega_n)$, 此式可写为

$$
V(\boldsymbol{q},\omega_n) = V_0(\boldsymbol{q},\omega_n) + V_0(\boldsymbol{q},\omega_n)\Pi^*(\boldsymbol{q},\omega_n)V(\boldsymbol{q},\omega_n) \qquad (2.4.13)
$$

由此可以解出

$$
V(\boldsymbol{q},\omega_n) = \frac{V_0(\boldsymbol{q},\omega_n)}{1-V_0(\boldsymbol{q},\omega_n)\Pi^*(\boldsymbol{q},\omega_n)}
$$

这个方程和 $T=0$K 的方程很相似. 但由于频率是分立的，不能把 $V(\boldsymbol{q},\omega_n)$ 解释为有效的物理势.

§2.5 实时格林函数

松原函数用于计算多粒子系统平衡态的热力学性质. 用本节介绍的实时格林函数可计算多体系统非平衡态的性质如输运过程、粒子在凝聚体中的非弹性散射以及有限温度下激发态的能量和寿命等.

一、实时格林函数

实时格林函数是场算符编时乘积对巨正则系综的统计平均,其定义是

$$\mathrm{i}G_{\alpha\beta}(x,x')\equiv\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}T[\hat{\psi}_{K\alpha}(x)\hat{\psi}^{+}_{K\beta}(x')]\} \tag{2.5.1}$$

$\hat{\rho}$ 是巨正则系综的统计算符. $\hat{\psi}_{\alpha}(x)$ 和 $\hat{\psi}^{+}_{\beta}(x')$ 是对于$\hat{K}$ 的 Heisenberg 绘景中的场算符,如

$$\hat{\psi}_{K\alpha}(x)=\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{K}t}\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{K}t}$$

$$\hat{K}=\hat{H}-\mu\hat{N} \tag{2.5.2}$$

T 是编时算符, 与第一章中的定义相同. G 除了依赖于空间、时间变量以外还依赖于 T 和 μ. 若 $\hat{H}$ 不依赖于时间,则格林函数只依赖于时间差$(t-t')$. 若系统又是均匀的则 G 可写为

$$G_{\alpha\beta}(x,x')=G_{\alpha\beta}(x-x') \tag{2.5.3}$$

若不考虑外磁场和铁磁性,则 G 对自旋坐标是对角的,

$$G_{\alpha\beta}(x)=\delta_{\alpha\beta}G(x) \tag{2.5.4}$$

对 $t>0$, (2.5.1)式变为

$$\mathrm{i}G^{>}(x)=(2s+1)^{-1}\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{\psi}_{K\alpha}(x)\hat{\psi}^{+}_{K\beta}(0)\} \tag{2.5.5}$$

对均匀系总动量算符 $\hat{P}$ 与 $\hat{K}=\hat{H}-\mu\hat{N}$ 对易, Heisenberg 算符可以写为

$$\hat{\psi}_{K\alpha}(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{P}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{K}t}\hat{\psi}_{\alpha}(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{K}t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{P}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{2.5.6}$$

由(2.5.5)式,(2.5.6)式得到

$$\mathrm{i}\,G^{>}(x)=(2s+1)^{-1}\,\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{K})}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{p}\cdot x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{K}t}\hat{\psi}_{\alpha}(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{K}t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{p}\cdot x}\psi_{\alpha}^{+}(0)\} \tag{2.5.7}$$

若选取 $\hat{H}$、$\hat{P}$、$\hat{N}$ 的共同本征态作为求迹的函数组,即

$$\begin{aligned}\hat{K}|m\rangle&=K_m|m\rangle=(E_m-\mu N_m)|m\rangle\\ \hat{P}|m\rangle&=\boldsymbol{P}_m|m\rangle\end{aligned} \tag{2.5.8}$$

则有

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\,G^{>}(x)&=(2s+1)^{-1}\mathrm{e}^{\beta\Omega}\sum_{m,n}\langle m|\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{K}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{p}\cdot x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{K}t}\\ &\quad\times\hat{\psi}_{\alpha}(0)\,|n\rangle\langle n|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{K}t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{p}\cdot x}\hat{\psi}_{\alpha}^{+}(0)\,|m\rangle\\ &=(2s+1)^{-1}\mathrm{e}^{\beta\Omega}\sum_{m,n}\mathrm{e}^{-\beta K_m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)\cdot x}\\ &\quad\times\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(K_n-K_m)t}\,|\langle m|\,\hat{\psi}_{\alpha}(0)\,|n\rangle|^2\end{aligned} \tag{2.5.9}$$

同理,对 $t<0$ 可以求出

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\,G^{<}(x)&=\pm(2s+1)^{-1}\mathrm{e}^{\beta\Omega}\sum_{m,n}\mathrm{e}^{-\beta K_n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)\cdot x}\\ &\quad\times\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(K_n-K_m)t}\,|\langle m|\,\hat{\psi}_{\alpha}(0)\,|n\rangle|^2\end{aligned} \tag{2.5.10}$$

格林函数是这两项之和

$$G(x)=\theta(t)G^{>}(x)+\theta(-t)G^{<}(x) \tag{2.5.11}$$

现在求 $G(x)$ 的傅氏分量

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=\iint\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}t\,G(\boldsymbol{x}t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}$$

代入(2.5.9)、(2.5.10)、(2.5.11)式,对空间积分给出 $\delta[\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)]$,对时间的积分需在区间 $(-\infty,0)$ 和 $(0,\infty)$ 上分别进行,并利用公式(1.3.40)式,可以求出

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=(2s+1)^{-1}\mathrm{e}^{\beta\Omega}\sum_{m,n}\Big\{(2\pi)^3$$

$$\delta[\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)|\langle m|\hat{\psi}_\alpha(0)|n\rangle|^2$$

$$\times\left[\frac{e^{-\beta K_m}}{\omega-(K_n-K_m)+i\eta}\mp\frac{e^{-\beta K_n}}{\omega-(K_n-K_m)-i\eta}\right]$$

(2.5.12)

可以看出，$G(\boldsymbol{k},\omega)$是 ω 的半纯函数，极点在 $\omega=K_n-K_m\pm i\eta$，相应的留数与 $|\langle m|\psi|n\rangle|^2$ 成正比. 有限温度的系综平均推广了绝对零度的公式. $|m\rangle$、$|n\rangle$ 现在都是激发态.

若 ω 是实数，则容易写出 $G(\boldsymbol{k},\omega)$的实数和虚数部分.

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}$$

$$\times\sum_{m,n}e^{-\beta K_m}(2\pi)^3\delta[\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)]|\langle m|\hat{\psi}_\alpha(0)|n\rangle|^2$$

$$\times\left\{\frac{P}{\omega-(K_n-K_m)}[1\mp e^{-\beta(K_n-K_m)}]\right.$$

$$\left.-i\pi\delta[\omega-(K_n-K_m)][1\pm e^{-\beta(K_n-K_m)}]\right\} \quad (2.5.13)$$

式中P代表积分主值. (2.5.13)式的实数和虚数部分可分别写为

$$\mathrm{Im}G(\boldsymbol{k},\omega)=-(2s+1)^{-1}\Pi e^{\beta\Omega-1}\sum_{m,n}e^{-\beta K_m}(2\pi)^3$$

$$\times\delta[\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)]|\langle m|\psi_\alpha|n\rangle|^2$$

$$\times\delta[\omega-(K_n-K_m)][1\pm e^{-\beta\omega}] \quad (2.5.14)$$

$$\mathrm{Re}G(\boldsymbol{k},\omega)=(2s+1)^{-1}e^{\beta\Omega}\sum_{m,n}e^{-\beta K_m}(2\pi)^3$$

$$\times\delta[\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)]|\langle m|\psi_\alpha|n\rangle|^2$$

$$\times\frac{P}{\omega-(K_n-K_m)}[1\mp e^{-\beta(K_n-K_m)}]$$

(2.5.15)

容易证明，实数部分可写为

$$\mathrm{Re}G(\boldsymbol{k},\omega)=-P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\pi}\frac{\mathrm{Im}G(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega-\omega'}\left[\mathrm{th}\frac{\beta\omega'}{2}\right]^{\pm1}$$

(2.5.16)

这是 Landau 首先推导出来的.

二、推迟和超前格林函数

由(2.5.16)式可以看出,$G(\boldsymbol{k},\omega)$既不是上半平面的解析函数也不是下半平面的解析函数. 在很多情况下引入推迟格林函数 G^{R} 和超前格林函数 G^{A} 比较方便. 它们分别在上半平面或下半平面解析. 它们和 G 的关系是

$$G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\mathrm{Re}G(\boldsymbol{k},\omega)+\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,G(\boldsymbol{k},\omega)\left[\mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}\right]^{\pm 1}$$

$$G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=\mathrm{Re}G(\boldsymbol{k},\omega)-\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,G(\boldsymbol{k},\omega)\left[\mathrm{th}\frac{\beta\omega}{2}\right]^{\pm 1} \tag{2.5.17}$$

函数 G^{R} 和 G^{A} 满足色散关系

$$\mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{\pi}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{Im}G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega'-\omega}\mathrm{d}\omega'$$

$$\mathrm{Re}G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{Im}G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega'-\omega}\mathrm{d}\omega'$$

根据复变函数论的定理可知, G^{R} 是 ω 平面上半平面的解析函数, G^{A} 是 ω 的下半平面的解析函数. 不难证明, G^{R} 和 G^{A} 就是下面定义的推迟和超前格林函数.

$$\mathrm{i}G^{\mathrm{R}}_{\alpha\beta}(x,x')=\theta(t-t')\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}[\hat{\psi}_{K\alpha}(x),\hat{\psi}^{+}_{K\beta}(x')]_{\mp}\}$$

$$\mathrm{i}G^{\mathrm{A}}_{\alpha\beta}(x,x')=-\theta(t'-t)\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}[\psi_{K\alpha}(x),\hat{\psi}^{+}_{K\beta}(x')]_{\mp}\} \tag{2.5.18}$$

对无磁场的不依赖于时间的均匀系,它们的傅氏变换为

$$G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=(2s+1)^{-1}\mathrm{e}^{\beta\Omega}\sum_{m,n}\Big\{\mathrm{e}^{-\beta K_m}(2\pi)^3$$

$$\times\delta[\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)]|\langle m|\psi_\alpha|n\rangle|^2$$

$$\times\frac{1\mp\mathrm{e}^{-\beta(K_n-K_m)}}{\omega-(K_n-K_m)+\mathrm{i}\eta}\Big\}$$

$$G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=(2s+1)^{-1}\mathrm{e}^{\beta\Omega}\sum_{m,n}\Big\{\mathrm{e}^{-\beta K_m}(2\pi)^3$$

$$\delta[\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)]|\langle m|\psi_\alpha|\boldsymbol{n}\rangle|^2$$

$$\times\frac{1\mp\mathrm{e}^{-\beta(K_n-K_m)}}{\omega-(K_n-K_m)-\mathrm{i}\eta}\Big\} \tag{2.5.19}$$

可以看出，G^{R}、G^{A}、也是 ω 的半纯函数，G^{R} 是上半平面的解析函数，G^{A}是下半平面的解析函数.

可以证明 G^{R} 和 G^{A} 有一定关系．定义

$$A(\boldsymbol{k},\omega)=(2s+1)^{-1}\mathrm{e}^{\beta\Omega}\sum_{m,n}\{\mathrm{e}^{-\beta K_m}(2\pi)^3\delta[\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)]$$

$$\times 2\pi\delta[\omega-(K_n-K_m)]$$

$$\times(1\mp\mathrm{e}^{-\beta\omega})|\langle m|\psi_\alpha|n\rangle|^2\} \tag{2.5.20}$$

A 依赖于 T 和 μ．G^{R} 和 G^{A} 的虚数部分可写为

$$\mathrm{Im}G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\ \omega)=-\frac{1}{2}A(\boldsymbol{k},\omega)$$

$$\mathrm{Im}G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\ \omega)=\frac{1}{2}A(\boldsymbol{k},\omega) \tag{2.5.21}$$

由(2.5.19)和(2.5.20)式可求出 G^{R} 和 G^{A} 的积分表示为

$$G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\ \omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}\ \frac{A(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega-\omega'+\mathrm{i}\eta}$$

$$G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\ \omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}\ \frac{A(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega-\omega'-\mathrm{i}\eta} \tag{2.5.22}$$

若引入复变量 z 的函数

$$\Gamma(\boldsymbol{k},z)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}\frac{A(\boldsymbol{k},\omega')}{z-\omega'} \tag{2.5.23}$$

则 $G^{\mathrm{R}}(G^{\mathrm{A}})$代表 z 从上(下) 半平面趋近实轴时的边界值，即

$$G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\Gamma(\boldsymbol{k},\omega+\mathrm{i}\eta)$$

$$G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=\Gamma(\boldsymbol{k},\omega-\mathrm{i}\eta) \tag{2.5.24}$$

对实数 ω，三个格林函数有相同的实数部分.

$$\text{Re}G(\boldsymbol{k},\omega)=\text{Re}G^{\text{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\text{Re}G^{\text{A}}(\boldsymbol{k},\omega) \tag{2.5.25}$$

而虚数部分由(2.5.21)式和下式给出

$$\text{Im}G(\boldsymbol{k},\omega)=-\frac{1}{2}\left[\text{th}\frac{\beta\omega}{2}\right]^{\mp1}A(\boldsymbol{k},\omega) \tag{2.5.26}$$

谱函数 $A(\boldsymbol{k},\omega)$包含多粒子系统许多重要的物理性质. $A(\boldsymbol{k},\omega)$ 的准确形式只有经过计算才能知道. 但从定义 (2.5.20)式仍可得到 $A(\boldsymbol{k},\omega)$的一些重要性质. 如果 ω 是正值, 则(2.5.20)式求和的每一项也是正的, 即 A 有如下性质

$$\begin{aligned} \text{sgn}\omega A(\boldsymbol{k},\omega)\geqslant0, &\quad \text{玻色子} \\ A(\boldsymbol{k},\omega)\geqslant0, &\quad \text{费密子} \end{aligned} \tag{2.5.27}$$

$A(\boldsymbol{k},\omega)$满足一个重要的求和规则. 考虑下面的积分

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\text{d}\omega}{2\pi}\text{i}G^{\text{R}}(\boldsymbol{k},\ \omega)\text{e}^{-\text{i}\omega\eta} &= \text{i}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\text{d}\omega'\text{d}\omega}{(2\pi)^2}\frac{A(\boldsymbol{k},\omega')\text{e}^{-\text{i}\omega\eta}}{\omega-\omega'+\text{i}\eta} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\text{d}\omega'}{2\pi}A(\boldsymbol{k},\omega') \end{aligned} \tag{2.5.28}$$

上式对 ω 的积分是由下半平面的迴路积分得到的. (2.5.28)式的左边也可由定义(2.5.18)式直接计算

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\text{d}\omega}{2\pi}\text{i}G^{\text{R}}(\boldsymbol{k},\omega)\text{e}^{-\text{i}\omega\eta} &= \int\text{d}^3x\text{e}^{-\text{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\text{i}G^{\text{R}}(\boldsymbol{x},\eta)=(2s+1)^{-1} \\ &\cdot\int\text{d}^3x\text{e}^{-\text{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\text{Tr}\{\hat{\rho}[\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x},0),\hat{\psi}^{+}_{K\alpha}(0)]_{\mp}\} \\ &= \int\text{d}^3x\text{e}^{-\text{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\delta(\boldsymbol{x})\text{Tr}\hat{\rho}=1 \end{aligned} \tag{2.5.29}$$

比较(2.5.28)、(2.5.29)式得到

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\text{d}\omega'}{2\pi}A(\boldsymbol{k},\omega')=1 \tag{2.5.30}$$

这对玻色子和费密子都是正确的. 由此可得到$|\omega|\to\infty$ 时格林函数的渐近性质

$$G^{\text{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=G^{\text{A}}(\boldsymbol{k},\omega)\approx\frac{1}{\omega}\int\frac{\text{d}\omega'}{2\pi}A(\boldsymbol{k},\omega')\approx\frac{1}{\omega},\quad |\omega|\to\infty \tag{2.5.31}$$

三、松原函数和解析延拓

我们将证明，谱函数 $A(\boldsymbol{k},\omega)$ 也决定松原函数$\mathscr{G}$. 由谱表示可以求出$\mathscr{G}$与 G^{R}、G^{A} 的关系.

对 $\tau>0$,松原函数可写为

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{x},\tau)=-(2s+1)^{-1}\mathrm{Tr}[\rho\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x}\tau)\hat{\psi}^{+}_{K\alpha}(0)]$$

$$=-(2s+1)^{-1}\mathrm{e}^{\beta\Omega}\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{-\beta\hat{K}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\hat{K}\tau}\hat{\psi}_{\alpha}(0)\mathrm{e}^{-\hat{K}\tau}$$

$$\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(0)]=-(2s+1)^{-1}\mathrm{e}^{\beta\Omega}\sum_{m,n}[\mathrm{e}^{-\beta K_m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_n-\boldsymbol{p}_m)\cdot\boldsymbol{x}}$$

$$\cdot\mathrm{e}^{-(K_n-K_m)\tau}Km|\psi_{\alpha}|n\rangle|^2 \tag{2.5.32}$$

它的傅氏变换为

$$\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_l)=\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_l\tau}\int\mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\mathscr{G}(\boldsymbol{x},\tau)$$

$$=(2s+1)^{-1}\mathrm{e}^{\beta\Omega}\sum_{m,n}\{\mathrm{e}^{-\beta K_m}(2\pi)^3\delta[\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{P}_n-\boldsymbol{P}_m)]|$$

$$\langle m|\psi_{\alpha}|n\rangle|^2\times[1\mp\mathrm{e}^{-\beta(K_n-K_m)}][\mathrm{i}\omega_l-(K_n-K_m)]^{-1}\} \tag{2.5.33}$$

对玻色子,$\omega_l=2l\pi/\beta$, 对费密子 $\omega_l=(2l+1)\pi/\beta$. 与(2.5.20)式比较可得到下面的重要关系

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\mathrm{i}\omega_l)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}\frac{A(\boldsymbol{k},\omega')}{\mathrm{i}\omega_l-\omega'} \tag{2.5.34}$$

这表明函数 $\Gamma(\boldsymbol{k},z)$也决定松原函数$\mathscr{G}$. $\mathscr{G}$和 G^{R} 的关系特别重要,因为 G^{R} 决定系统对外界的响应. 比较(2.5.22)和(2.5.34)式可以看出,$\omega_l>0$ 时$\mathscr{G}$和 $G^{\mathrm{R}}(\omega)$ 的关系是

$$\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_l)=G^{\mathrm{R}}(\mathrm{i}\omega_l) \tag{2.5.35}$$

由此可见，根据已知的$\mathscr{G}$可确定 G^{R}. 设想我们已知所有频率 ω_l 的$\mathscr{G}$,并建立了在上半 z 平面解析的函数$\Gamma(z)$,它具有下列性质

$$\Gamma(\mathrm{i}\omega_l)=\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_l),\qquad \omega_l>0$$

这时根据复变函数论的熟知定理我们立即得出，在整个上半平面 $\Gamma(z)$ 和 $G^{\mathrm{R}}(z)$ 重合. 这样求函数 $G^{\mathrm{R}}(\omega)$ 的问题就归结为把 $\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_l)$ 从不连续的点集解析延拓到整个平面. 实际计算中先求出 $\mathscr{G}(\boldsymbol{k}, \omega_l)$，这时只在一些分立的点知道 $\Gamma(\boldsymbol{k}, z)$. 然后完成向全平面的解析延拓. 无进一步知识这样的延拓不是唯一的. 假定 $\Gamma(\boldsymbol{k}, z)$ 是一个可能的延拓，则对任何整数 p，函数 $\mathrm{e}^{2\pi p z/\omega_l}\Gamma(\boldsymbol{k}, z)$ 是另一个可能的延拓，因为当 $z=\mathrm{i}\omega_l$ 时它变为 $\Gamma(\boldsymbol{k}, \omega_l)$. 然而这些不同的延拓在 z 平面各处都是不同的，包括无穷远点. 因为求和规则要求 $|z|\to\infty$ 时 $\Gamma(\boldsymbol{k}, z)\to z^{-1}$，这使我们可选取正确的延拓.

由 $\mathscr{G}(\boldsymbol{k}, \omega)$ 可直接计算 $A(\boldsymbol{k}, \omega)$. 形式上考虑 $i\omega_n$ 为连续变量，则谱函数可以写为

$$A(\boldsymbol{k}, x)=\frac{1}{i}[\mathscr{G}(\boldsymbol{k}, \omega_n)|_{\mathrm{i}\omega_n=x-\mathrm{i}\eta}-\mathscr{G}(\boldsymbol{k}, \omega_n)|_{\mathrm{i}\omega_n=x+\mathrm{i}\eta}] \tag{2.5.36}$$

由 $\mathscr{G}(\boldsymbol{k}, \omega_n)$ 的任何近似可直接算出 $A(\boldsymbol{k}, \omega)$，因而可算出 G、$G^{\mathrm{R,A}}$. 考虑一个特别简单的例子，对自由粒子系统

$$\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k}, \omega_n)=\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu)}$$

由此可求出谱函数

$$\begin{aligned}A(\boldsymbol{k}, \omega)&=\frac{1}{\mathrm{i}}\left[\frac{1}{\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu)-\mathrm{i}\eta}-\frac{1}{\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu)+\mathrm{i}\eta}\right]\\&=2\pi\delta[\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu)]\end{aligned} \tag{2.5.37}$$

正好是一个 δ 函数. $A(\boldsymbol{k}, \omega)$ 可解积为几率函数. 它是一个粒子有动量 $\boldsymbol{k}$ 和能量 ω 的几率. 对自由粒子，$\omega=\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu$，因此几率分布变为 δ 函数：对一个 $\boldsymbol{k}$ 值只有一个 ω 值. (2.5.37) 的图示于图 2-5. 对某一确定的 $\boldsymbol{k}$，$A(\boldsymbol{k}, \omega)$ 对 ω 的图是一个中心位于 $\omega=\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\mu$ 的 δ 函数. 对相互作用系统，$A(\boldsymbol{k}, \omega)$ 变宽如图 2.5 中的 A 所示. 对每个 $\boldsymbol{k}, \omega$ 的取值变为一个带，这是不奇怪的. 粒子受到散射时

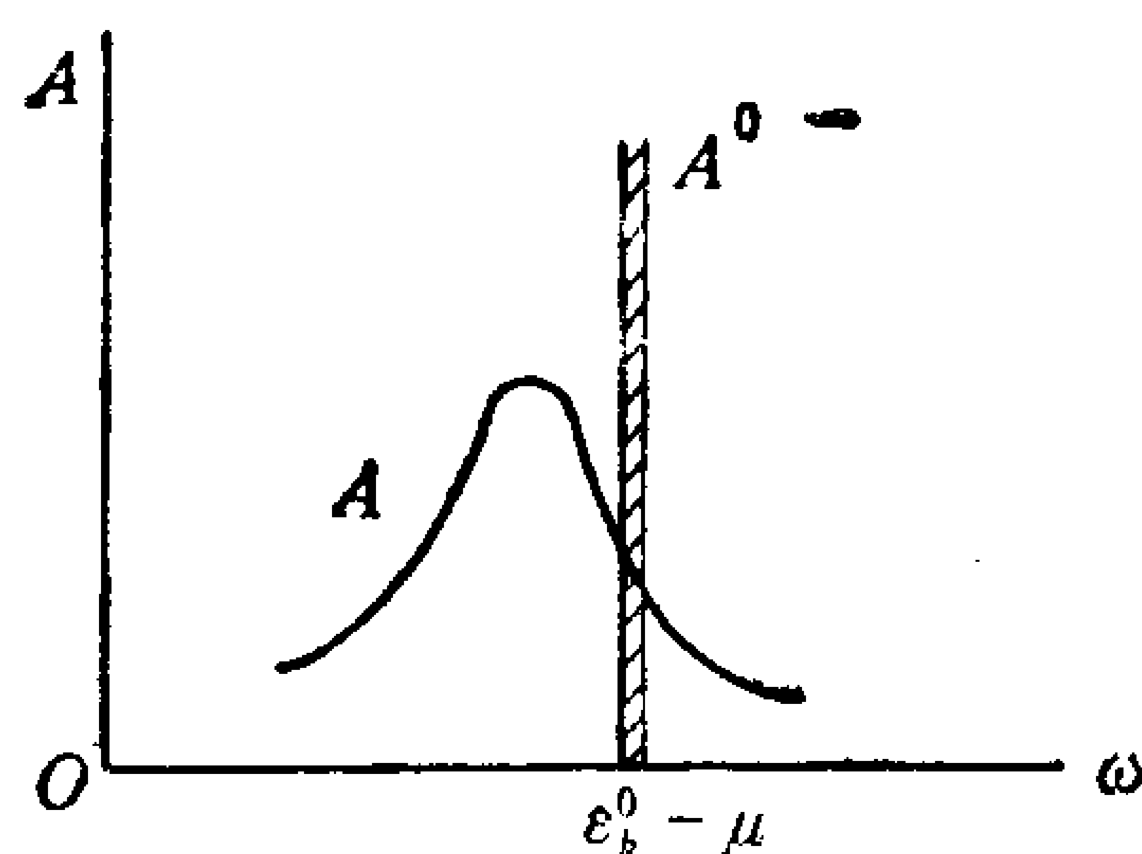


图 2.5

有有限的平均自由程，因而动量和能量有某种不确定性．我们必须将 $\boldsymbol{k}$ 和 ω 当作独立变量，计算某个物理量时要对两者同时平均.

§2.6 线性响应理论 ($T>0$)

本章前面几节介绍的松原函数方法适于研究多粒子系统热力学平衡态的性质，不能直接应用于研究系统非平衡态的性质．当外界扰动比较弱时可用本节介绍的线性响应理论研究系统非平衡态的性质．$T>0$ 时的线性响应理论须要引入双时格林函数．双时格林函数不仅用于研究系统非平衡态的性质，在凝聚态平衡性质(如固体磁性、超导、一维导体等)的研究中也有广泛应用．本节在介绍线性响应理论的同时还比较详细地介绍了双时格林函数的理论.

一、多体系统的线性响应

假定系统的哈密顿量 $\hat{H}$ 不依赖于时间，讨论系统对外界的响应．用 $\hat{H}_1$ 表示系统与外场的相互作用，则总哈密顿量是

$$\hat{H}_T=\hat{H}+\hat{H}_1 \tag{2.6.1}$$

一般情况下 $\hat{H}_1$ 依赖于时间．假定 $t\to-\infty$ 时不存在外界微扰，即

$$\hat{H}_1|_{t\to-\infty}=0 \tag{2.6.2}$$

且 $\hat{H}_1$ 可表示为

$$\hat{H}_1=-\sum_i \hat{B}_i F_i(t) \tag{2.6.3}$$

其中 $F_i(t)$ 是依赖于时间的函数（但不是算符），代表外界的驱动力. $\hat{B}_i$ 是不显含时间的算符.

统计算符 ρ 满足量子刘维方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial\rho}{\partial t}=[\hat{H}+\hat{H}_1,\rho] \tag{2.6.4}$$

和初始条件

$$\rho|_{t\to-\infty}=\rho_0'=\frac{1}{Z}\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \tag{2.6.5}$$

其中

$$\begin{gathered}Z=\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\\ \mathrm{Tr}\rho_0'=1\end{gathered} \tag{2.6.6}$$

ρ_0' 是无外场但考虑粒子之间相互作用时系统的统计算符. 作正则变换

$$\rho_1=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\rho\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \tag{2.6.7}$$

可求出 ρ_1的方程为

$$\begin{gathered}\mathrm{i}\frac{\partial\rho_1}{\partial t}=[\hat{H}_1(t),\rho_1]\\ \hat{H}_1(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{H}_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\end{gathered} \tag{2.6.8}$$

其初始条件是

$$\rho_1|_{t\to-\infty}=\rho_0' \tag{2.6.9}$$

$\hat{H}_1(t)$是 $\hat{H}_1$ 在 Heisenberg 绘景中的微扰算符，但从总哈密顿函数 $\hat{H}_T$ 看来，(2. 6. 8) 式第二式表示相互作用表象.

方程(2. 6. 8)式和初始条件(2. 6. 9)式可写成一个积分方程

$$\hat{\rho}_1(t)=\hat{\rho}_0'+\frac{1}{\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{t}[\hat{H}_1(t'),\hat{\rho}_1(t')]\mathrm{d}t' \qquad (2.6.10)$$

或者

$$\hat{\rho}(t)=\hat{\rho}_0'+\frac{1}{\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t')}[\hat{H}_1,\hat{\rho}]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}(t-t')}\mathrm{d}t' \qquad (2.6.11)$$

若微扰 $\hat{H}_1$ 很小,则上式可用逐次逼近法求解,一级近似为

$$\hat{\rho}(t)=\hat{\rho}_0'+\frac{1}{\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{t}[\hat{H}_1(t'-t),\hat{\rho}_0']\mathrm{d}t' \qquad (2.6.12)$$

任意算符 $\hat{A}$ 的统计平均值定义为

$$\langle\hat{A}\rangle=\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) \qquad (2.6.13)$$

将(2.6.12)式代入(2.6.13)式, 并利用求迹对算符的循环置换保持不变的事实,可得

$$\langle\hat{A}\rangle=\langle\hat{A}\rangle_0+\frac{1}{\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{t}\langle[\hat{A}(t),\hat{H}_1(t')]\rangle_0\mathrm{d}t' \qquad (2.6.14)$$

其中

$$\hat{A}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{A}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \qquad (2.6.15)$$

是 Heisenberg 绘景中的算符,

$$\langle\cdots\rangle_0=\mathrm{Tr}(\hat{\rho}_0'\cdots) \qquad (2.6.16)$$

是对平衡统计算符(2.6.5)式的平均.

(2.6.14)式是量子统计系综中附加微扰 $\hat{H}_1$时,算符$\hat{A}$ 的平均值的推迟响应. 只有 t 时刻之前的微扰才对 t 时算符的平均值 $\langle\hat{A}(t)\rangle$有影响,响应具有因果性质.

利用阶跃函数 $\theta(x)$可把 (2.6.14) 式对时间积分的上限扩大到$+\infty$,即将(2.6.14)式写为

$$\langle A\rangle=\langle A\rangle_0+\int_{-\infty}^{\infty}\langle\langle\hat{A}(t)\hat{H}_1(t')\rangle\rangle\mathrm{d}t' \qquad (2.6.17)$$

其中

$$\langle\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle\rangle=\theta(t-t')\frac{1}{\mathrm{i}}\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]\rangle_0 \qquad (2.6.18)$$

是 Bogolyubov 和 Tyablikov 引入量子统计力学中的推迟双时格林函数. 利用 Tr 符号下算符循环置换的性质可以证明推迟格林函数只与时间差$(t-t')$有关.

(2.6.17)式用格林函数给出量子统计系综对力学微扰的线性响应的表达式. 对于(2.6.3)式的外界微扰,我们有

$$\langle A\rangle=\langle A\rangle_0-\sum_i\int_{-\infty}^{\infty}\langle\langle\hat{A}(t)\hat{B}_i(t')\rangle\rangle F_i(t')\mathrm{d}t' \quad (2.6.19)$$

(2.6.19)式称为量子体系线性响应的 Kubo 公式. 本节将在推迟格林函数的基础上介绍线性响应理论.

二、双时格林函数

依赖于两个算符 $\hat{A}(t)$、$\hat{B}(t')$ 的格林函数称为双时格林函数,$\hat{A}$、$\hat{B}$ 一般不是简单的场算符如 ψ、ψ^+ 等. 双时格林函数包括推迟和超前格林函数以及因果格林函数即用 $\hat{A}(t)$、$\hat{B}(t')$ 定义的实时格林函数. 如上所述, 量子系综对外界力学微扰的响应可用推迟双时格林函数表示. 下面考察双时格林函数的基本性质, 并讨论各种类型格林函数之间的关系.

推迟格林函数 $G^{\mathrm{R}}(t, t')$、超前格林函数 $G^{\mathrm{A}}(t,t')$ 的定义如下:

$$\mathrm{i}G^{\mathrm{R}}(t,t')=\mathrm{i}\langle\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle\rangle_R=\theta(t-t')\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]_\varepsilon\rangle$$
$$\mathrm{i}G^{\mathrm{A}}(t,t')=\mathrm{i}\langle\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle\rangle_A=-\theta(t'-t)\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]_\varepsilon\rangle \quad (2.6.20)$$

其中$\langle\cdots\rangle$表示对平衡巨正则系综的平均. $\hat{A}(t)$和 $\hat{B}(t')$是任意一对算符,其时间变量意味着 Heisenberg 绘景

$$\hat{A}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{A}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \quad (2.6.21)$$

G^{R} 出现在线性响应的公式中, 但线性响应理论中的 G^{R} 的定义中没有角标 ε. ε 的定义是

$$[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]_\varepsilon=\hat{A}(t)\hat{B}(t')+\varepsilon\hat{B}(t')\hat{A}(t) \qquad (2.6.22)$$

$\varepsilon=-1$ 时为对易关系，$\varepsilon=+1$ 时为反对易关系．ε 的取值与具体问题有关．若 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是玻色算符则 $\varepsilon=-1$，若是费密算符则取 $\varepsilon=+1$．线性响应理论中 $\varepsilon=-1$，$\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 一般是算符乘积，满足复杂的对易关系．

定义松原函数

$$\begin{aligned}\mathscr{G}(\tau,\tau')&=-\langle T_\tau[\hat{A}(\tau)\hat{B}(\tau)]_\varepsilon]\rangle\\&=-\langle\hat{A}(\tau)\hat{B}(\tau')\rangle\theta(\tau-\tau')+\varepsilon\langle\hat{B}(\tau')\hat{A}(\tau)\rangle\theta(\tau'-\tau)\end{aligned} \qquad (2.6.23)$$

这样定义的松原函数可用微扰论进行计算．

下面讨论G^R、G^A、$\mathscr{G}$的谱表示及它们之间的关系．很多地方与§2-5节中的讨论在形式上是相似的，所以只把主要的步骤写出来．

因为 $G^R(t,t')$ 只依赖于时间差 $(t-t')$，故可作傅氏变换

$$\begin{aligned}G^R(\omega)&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}(t-t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}G^R(t-t')\\&=-\mathrm{i}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\langle[\hat{A}(t),\ \hat{B}(0)]_\varepsilon\rangle\end{aligned} \qquad (2.6.24)$$

现在将 $G^R(\omega)$ 写为谱表示的形式．应该注意，$\hat{A}(t)$、$\hat{B}(t)$ 是对 $\hat{H}$ 的 Heisenberg 绘景中的算符，这从线性响应理论的推导过程可以看出．但实际问题中 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 一般情况下与总粒子数算符 $\hat{N}$ 是对易的，这使我们可将 $\hat{A}(t)$ 写为

$$\hat{A}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{K}t}\hat{A}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{K}t}$$

$$\hat{K}=\hat{H}-\mu\hat{N}$$

$\hat{B}(t)$ 也有相似的形式．假定 $|m\rangle$ 是 $\hat{K}$ 的本征态

$$\hat{K}|m\rangle=K_m|m\rangle$$

则 $G^R(\omega)$ 可以写为

$$G^{\mathrm{R}}(\omega)=-\mathrm{i}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\frac{1}{Z}\sum_{m,n}[\mathrm{e}^{-\beta K_m}+\varepsilon\mathrm{e}^{-\beta K_n}]A_{mn}B_{nm}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(K_m-K_n)t}$$

(2.6.25)

其中

$$A_{mn}=\langle m|\hat{A}(0)|n\rangle=\langle m|\hat{A}|n\rangle \tag{2.6.26}$$

假定积分与求和的次序可以交换，完成对时间的积分后得到

$$G^{\mathrm{R}}(\omega)=-\frac{1}{Z}\sum_{m,n}\left[\frac{\mathrm{e}^{-\beta K_m}+\varepsilon\mathrm{e}^{-\beta K_n}}{K_n-K_m-\omega-\mathrm{i}\delta}\right]A_{mn}B_{nm} \tag{2.6.27}$$

也可将 $G^{\mathrm{R}}(\omega)$ 写为

$$G^{\mathrm{R}}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\frac{A(x)}{\omega-x+\mathrm{i}\delta} \tag{2.6.28}$$

$A(x)$是谱函数，其定义为

$$\begin{aligned}A(x)&=\frac{1}{Z}\sum_{m,n}[\mathrm{e}^{-\beta K_m}+\varepsilon\mathrm{e}^{-\beta K_n}]A_{mn}B_{nm}\delta(x-K_n+K_m)\\&=\frac{1}{Z}(1+\varepsilon\mathrm{e}^{-\beta x})\sum_{m,n}\mathrm{e}^{-\beta K_m}A_{mn}B_{nm}\delta(x-K_n+K_m)\end{aligned}$$

(2.6.29)

由此可推出下式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\frac{A(x)}{1+\varepsilon\mathrm{e}^{-\beta x}}=\frac{1}{Z}\sum_{m,n}\mathrm{e}^{-\beta K_m}A_{mn}B_{nm}=\langle\hat{A}\hat{B}\rangle \tag{2.6.30}$$

超前格林函数的傅氏变换 $G^{\mathrm{A}}(\omega)$是

$$G^{\mathrm{A}}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\frac{A(x)}{\omega-x-\mathrm{i}\delta} \tag{2.6.31}$$

G^{R}、G^{A} 可用一个公式表示为

$$G^{\mathrm{R,A}}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\frac{A(x)}{\omega-x\pm\mathrm{i}\delta} \tag{2.6.32}$$

谱函数可用 G^{R}、G^{A} 表示为

$$G^{\mathrm{R}}(\omega)-G^{\mathrm{A}}(\omega)=-2\pi\mathrm{i}A(x) \tag{2.6.33}$$

$\mathscr{G}(\tau)$的傅氏变换 $\mathscr{G}(\zeta_l)$可写为

$$\mathscr{G}(\zeta_l)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\frac{A(x)}{\mathrm{i}\zeta_l-x} \tag{2.6.34}$$

因此同一个谱函数决定 G^{R}、G^{A} 和$\mathscr{G}$，只要我们求出其中的一个就可以求得其它两个. 处理实际问题时通常先用微扰论求出松原函数 $\mathscr{G}$，然后经解析延拓求出 G^{R}，从而计算出系统的线性响应. (2.6.1)式中 $\hat{H}$ 是系统的哈密顿量，不包括系统与外场的相互作用，一般可写为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_{\mathrm{I}}$$

其中 $\hat{H}_{\mathrm{I}}$ 代表粒子之间的相互作用，如电子之间的库仑作用，电声子相互作用，电子与杂质的相互作用等等. $\hat{H}_0$ 是自由粒子系统的哈密顿. 用 $T>0$ 的微扰论可将 $\mathscr{G}(\tau)$写为

$$\mathscr{G}(\tau)=-\frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}\mathrm{T}_\tau\left[\exp\left(-\int_0^\beta\hat{H}_{\mathrm{I}}(\tau')\mathrm{d}\tau'\right)\hat{A}(\tau)\hat{B}(0)\right]\right\} \tag{2.6.35}$$

展开为级数则有

$$\mathscr{G}(\tau)=-Z^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta\mathrm{d}\tau_1\cdots\int_0^\beta\mathrm{d}\tau_n\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta\hat{K}_0}\mathrm{T}_\tau$$

$$\cdot[\hat{H}_{\mathrm{I}}(\tau_1)\cdots\hat{H}_{\mathrm{I}}(\tau_n)\hat{A}(\tau)\hat{B}(0)]\} \tag{2.6.36}$$

$\hat{A}(\tau)$和 $\hat{B}(0)$在一般情况下是单粒子算符，有下面的形式

$$\hat{A}=\sum_{\boldsymbol{k},q}A_{\boldsymbol{k}q}C^{+}_{\boldsymbol{k}+q}C_{\boldsymbol{k}} \tag{2.6.37}$$

式中略去了粒子自旋. 我们可以作出被积函数的费曼图，图中一个点或顶角代表算符 $\hat{A}(\tau)$，另一个代表 $\hat{B}(0)$. 只有电子线与这两点相连，没有声子线或库仑线与这两点相连. 这两个特殊的顶角称为外顶角. 图形规则与松原函数的规则相同. 但要注意 (a) 标为 τ 的顶角带有因子 $A_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{g}}$，$\boldsymbol{k}$ 是进入顶角的电子线的动量，$\boldsymbol{k}+\boldsymbol{g}$

是离开顶角的电子线的动量. (b)标为"0" 的顶角带有因子 B_{kg}.
(c) 在顶角 τ 和 0 动量不守恒.

图形也可分为相连图和不相连图，相连图指那些直接或间接与外顶角相连的图形. 图 2.6 是相连图和不相连图的例子.

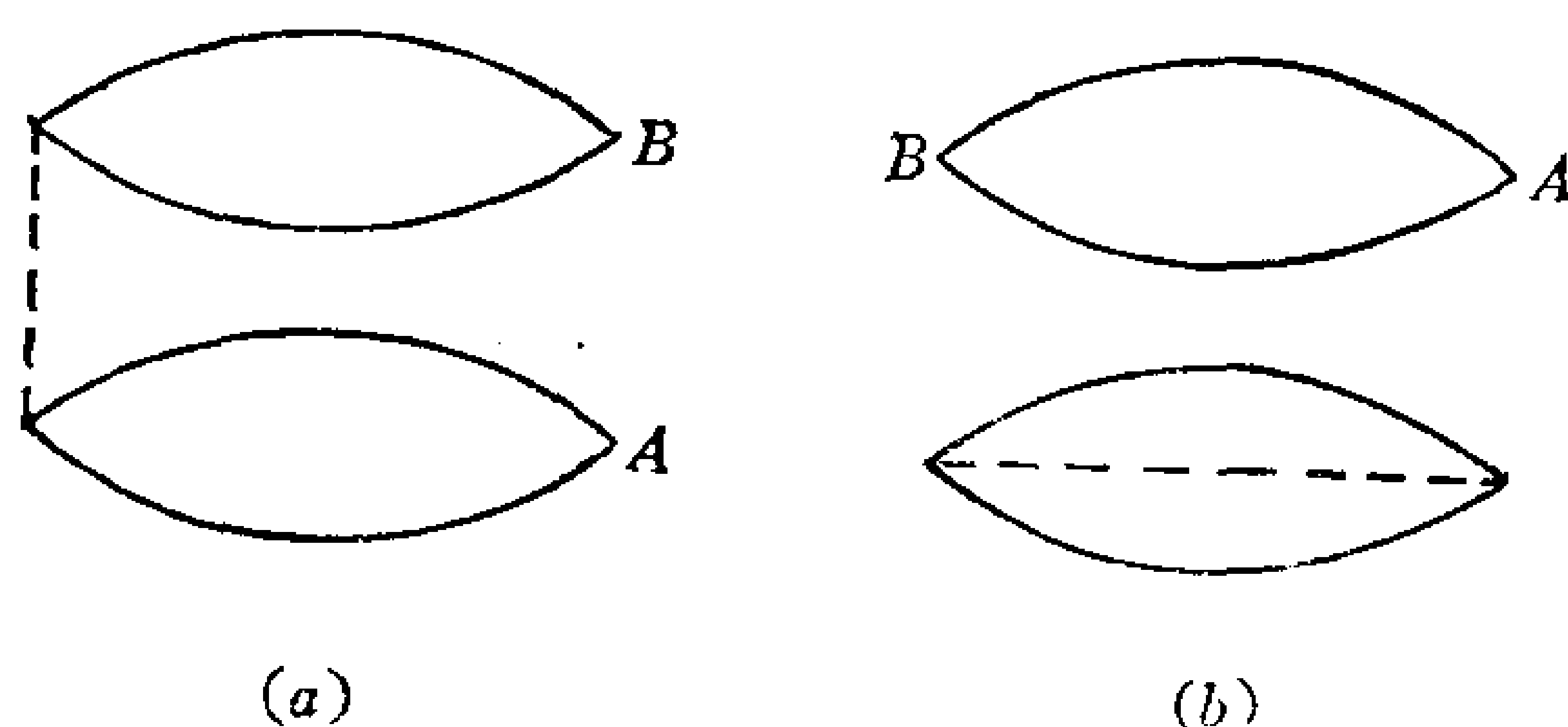


图 2.6 对响应函数的贡献，(a)相连图 (b)不相连图.

我们可以略去不相连图同时取对自由粒子系统巨正则系综的平均，即有

$$\mathscr{G}(\tau)=-Z_0^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\mathrm{Tr}\Big\{\mathrm{e}^{-\beta\hat{K}_0}\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau_1\cdots\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau_n T_\tau[\hat{H}_1(\tau_1)\cdots \hat{H}_1(\tau_n)\hat{A}(\tau)\hat{B}(0)]\Big\}_c \tag{2.6.38}$$

"c"表示只计算相连图.

用图形规则求得 $\mathscr{G}(\tau)$后用傅氏变换求得 $\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_n)$ 或直接在动量空间求出 $\mathscr{G}(\mathrm{i}\omega_n)$，再用解析延拓求得 G^{R} 或 G^{A}. 用这种方法可以研究粒子之间各种相互作用对线性响应的影响. 在第 6 章与第 9 章将用此方法研究固体电导和光学性质.

三、运动方程

求解双时格林函数的另一方法是求解格林函数的运动方程. 算符 $\hat{A}(t)$、$\hat{B}(t)$ 满足下面的运动方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}=\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A} \tag{2.6.39}$$

G^{R}、G^{A} 共同满足的方程为

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}G(t-t') &= \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle\rangle \\
&= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\theta(t-t')\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]_c\rangle \\
&\quad + \langle\langle \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t}\hat{B}(t')\rangle\rangle
\end{aligned}
$$

因此，以下不用表示区分格林函数类型的角标 R、A，简单的记为 G 及$\langle\langle\cdots\rangle\rangle$. 考虑到 $\hat{A}$ 的运动方程上式可写为

$$
\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}G(t-t') = \delta(t-t')\langle[\hat{A}(0),\hat{B}(0)]\rangle + \langle\langle[\hat{A}(t),\ \hat{H}]\cdot\hat{B}(t')\rangle\rangle \tag{2.6.40}
$$

这里已考虑到，在统计平衡情况下$\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t')\rangle$ 只依赖于时间差 $t-t'$，因而有

$$
\langle\hat{A}(t)\hat{B}(t)\rangle = \langle\hat{A}(0)\hat{B}(0)\rangle
$$
$$
\hat{A}(0)=\hat{A},\quad \hat{B}(0)=\hat{B}
$$

一般情况下哈密顿量 $\hat{H}$ 包含粒子之间的相互作用，因此$[\hat{H},\hat{A}]$不仅包括 $\hat{A}$ 而且包括更复杂的算符 $\hat{A}_1(t)$. (2.6.40)式的第二项将包含更高级的格林函数$\langle\langle\hat{A}_1(t)\hat{B}(t')\rangle\rangle$而方程并不封闭. 如果推导 $G(\hat{A}_1,\hat{B})$的运动方程则将出现更高级的格林函数. 这样我们就得到了一个运动方程的链，是由 $\hat{H}$ 中的相互作用项引起的，在讨论多体问题时几乎不可避免. 特殊情况下在有限步骤之后链可以封闭，这时我们得到一个算符 $\hat{A}(t)$、$\hat{A}_1(t)\cdots\hat{A}_n(t)$的完全组，它们的代数是封闭的. 但一般情况下，只有作了某种近似之后才会得到封闭的方程组. 特别是对热力学极限和无穷自由度，方程的链总是一个无穷序列.

现在还没有准确求解运动方程的普遍适用的方法. 通常使用的一种近似方法是所谓切断近似. 由运动方程的链可以看出，为

了决定低级格林函数必须知道高级格林函数．如果我们引入一个假定，将高级格林函数用低级格林函数表示，方程组就变为封闭的了．略去更高级的方程组，方程的链就在中途退耦．近似的准确程度决定于切断的方式即将高级格林函数表为低级格林函数的方式。现在还缺乏一般的判据，为了检验结论的正确性须要与实验结果及其它理论计算结果进行比较．

“切断近似”方法的好处，是可以直接处理格林函数，而不必通过松原函数计算．它的缺点是物理实质不像图形技术那样明确．“切断近似”在凝聚态物理的很多分支中都有应用，具体例子可参考李正中的《固体理论》．

§2.7 闭路格林函数

本节讨论实时格林函数的微扰展开并引入闭路格林函数．零温格林函数和松原函数的微扰展开方法不能直接应用于实时格林函数．根据§2-5中的讨论，用微扰论求出松原函数后用解析开拓的方法可以求出推迟及超前格林函数 G^{R} 和 G^{A}，并可求出实时格林函数．为了直接求出实时格林函数的微扰展开，六十年代初 Schwinger、Keldysh 等人引进了一个由 $t=-\infty$ 的状态出发，沿 t 轴到 $t=+\infty$，再沿 t 轴返回 $t=-\infty$ 状态的全时闭路 S 矩阵，并提出了一种新的格林函数称为闭路格林函数．近年来闭路格林函数已应用于非平衡统计的各种问题如自旋系统、超导、激光、固体物性、等离子体等，是讨论输运过程的理论基础．本节以单粒子格林函数为例讨论闭路格林函数的基本内容，其结果不难推广到多粒子格林函数．

一、闭路格林函数

闭路格林函数是研究实时格林函数的微扰展开时引入的．下

面先将零温格林函数与实时格林函数的微扰展开进行对比，以说明实时格林函数微扰展开中遇到的问题.

格林函数是在Heisenberg绘景中定义的，为了进行微扰展开需要变换到相互作用绘景. $T=0\mathrm{K}$ 时，根据§1-2中的讨论

$$\begin{aligned}&\langle\Psi_{\mathrm{H}}^{0}|T[\hat{A}_{\mathrm{H}}(t)\hat{B}_{\mathrm{H}}(t')]|\Psi_{\mathrm{H}}^{0}\rangle\\&=\langle\Phi_{0}|S^{-1}(\infty,-\infty)T[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t')S(\infty,-\infty)]|\Phi_{0}\rangle\end{aligned}\tag{2.7.1}$$

其中 $|\Psi_{\mathrm{H}}^{0}\rangle$ 是Heisenberg绘景中的基态. $|\Phi_0\rangle$ 是相互作用绘景中的基态，$\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是任意两个算符. 如果相互作用是绝热地引入的，则 $|\Phi_0\rangle$ 是自由粒子系统的基态，是非简并的，在无穷慢引入相互作用时不跃迁到另一个态. 因此 $S(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle$ 也是系统的基态，与 $|\Phi_0\rangle$ 只差一个相因子，即

$$S(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}L}|\Phi_0\rangle\tag{2.7.2}$$

因此得到

$$\begin{aligned}&\langle\Psi_{\mathrm{H}}^{0}|T[\hat{A}_{\mathrm{H}}(t)\hat{B}_{\mathrm{H}}(t')]|\Psi_{\mathrm{H}}^{0}\rangle\\&=\frac{\langle\Phi_0|T[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t')S(\infty,-\infty)]|\Phi_0\rangle}{\langle\Phi_0|S(\infty,-\infty)|\Phi_0\rangle}\end{aligned}\tag{2.7.3}$$

这个公式及类似的两个以上算符的变换公式是零温格林函数微扰论的基础.

实时格林函数是在巨正则系综中定义的. 我们要讨论的是Heisenberg绘景中两个算符编时乘积对巨正则系综的平均值，即

$$\langle T[\hat{A}_{\mathrm{H}}(t_1)\hat{B}_{\mathrm{H}}(t_2)]\rangle=\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}T[\hat{A}_{\mathrm{H}}(t_1)\hat{B}_{\mathrm{H}}(t_2)]\}\tag{2.7.4}$$

其中 $\hat{\rho}$ 是巨正则系综的统计算符. 现在将上式变换到相互作用绘景，$\hat{\rho}$ 按一般的算符进行变换. 设 $t_1>t_2$，则有

$$\begin{aligned}&\langle \mathrm{T}[\hat{A}_{\mathrm{H}}(t_1)\hat{B}_{\mathrm{H}}(t_2)]\rangle=\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}_{\mathrm{H}}(t_1)\hat{B}_{\mathrm{H}}(t_2)\}\\&=\mathrm{Tr}\{\hat{U}(0,-\infty)\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(-\infty)\hat{U}(-\infty,0)\hat{U}(0,t_1)\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)\\&\quad\hat{U}(t_1,0)\hat{U}(0,t_2)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t_2)\hat{U}(t_2,0)\}\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&=\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(-\infty)\hat{U}(-\infty,\infty)\hat{U}(\infty,0)\hat{U}(0,t_1)\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)\\
&\quad\hat{U}(t_1,t_2)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t_2)\hat{U}(t_2,0)\hat{U}(0,-\infty)\}\\
&=\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(-\infty)\hat{S}(-\infty,\infty)\mathrm{T}[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t_2)S(\infty,-\infty)]\}
\end{aligned}
\tag{2.7.5}
$$

仍假定相互作用是绝热引入的，$t\to\infty$或$t\to-\infty$时$\hat{H}_1\mathrm{e}^{-\delta|t|}\to 0$，则有

$$
\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(-\infty)=\hat{\rho}_0=Z_0^{-1}\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}
\tag{2.7.6}
$$

$\hat{\rho}_0$是自由粒子巨正则系综的统计算符．将(2.7.5)式写为取统计平均的形式则有

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_0 S(-\infty,\infty)\mathrm{T}[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t_2)S(\infty,-\infty)]\}\\
&=Z_0^{-1}\sum_{N,j}{}_0\langle Nj|\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}_0-\mu\hat{N})}S(-\infty,\infty)\mathrm{T}[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_1)\hat{B}_{\mathrm{I}}(t_2)\\
&\quad\times S(\infty,-\infty)]|Nj\rangle_0
\end{aligned}
\tag{2.7.7}
$$

$|Nj\rangle_0$是自由粒子系统激发态和基态的集合．激发态一般是简并的，即使$\hat{H}_1$的引入是无穷慢的，态之间也是跃迁发生．(2.7.2)式对这些$|Nj\rangle_0$态并不成立．因此对实时格林函数我们不能得到(2.7.3)式那样的展开公式．

(2.7.7)式中有因子$S(-\infty,+\infty)$，它与$S(\infty,-\infty)$是不同的．根据第一章的讨论，$S(\infty,-\infty)$，是$\hat{U}(t_1,t_2)$，$t_1>t_2$，在$t_1\to\infty$、$t_2\to-\infty$时的极限，我们已经证明

$$
\hat{U}(t_1,t_2)=T\exp\left[-\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}\hat{H}_1(t)\mathrm{d}t\right],\ t_1>t_2
\tag{2.7.8}
$$

所以

$$
S(\infty,-\infty)=T\exp\left[-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\hat{H}_1(t)\mathrm{d}t\right]
\tag{2.7.9}
$$

$S(-\infty,\infty)$是$\hat{U}(t_1,t_2)$，$t_1<t_2$，在$t_1\to-\infty$，$t_2\to\infty$时的极限．可以证明

$$\hat{U}(t_1,t_2)=\tilde{T}\exp\left[-\mathrm{i}\int_{t_2}^{t_1}\hat{H}_1(t)\mathrm{d}t\right],t_1<t_2$$

$$=\tilde{T}\exp\left[\mathrm{i}\int_{t_1}^{t_2}\hat{H}_1(t)\mathrm{d}t\right] \tag{2.7.10}$$

$\tilde{T}$ 是反编时算符，即将 t 大的算符排在 t 小的算符的右边. 因此有

$$S(-\infty,\infty)=\tilde{T}\exp\left[+\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\hat{H}_1(t)\mathrm{d}t\right] \tag{2.7.11}$$

(2.7.11) 式也可用另一方法证明. 因为 $S(-\infty,\ \infty)=S(\infty,\ -\infty)^+$，将 $S(\infty,-\infty)$展开成$\hat{H}_1(t)$的幂级数，然后取共轭，这时展开式每一项中 $\hat{H}_1(t)$算符的次序倒过来，并用 $-\mathrm{i}$ 代替 i，这样就得到(2.7.11)式.

现在在时间轴上引入一个闭合回路 C 如图 2.7 所示. 它由

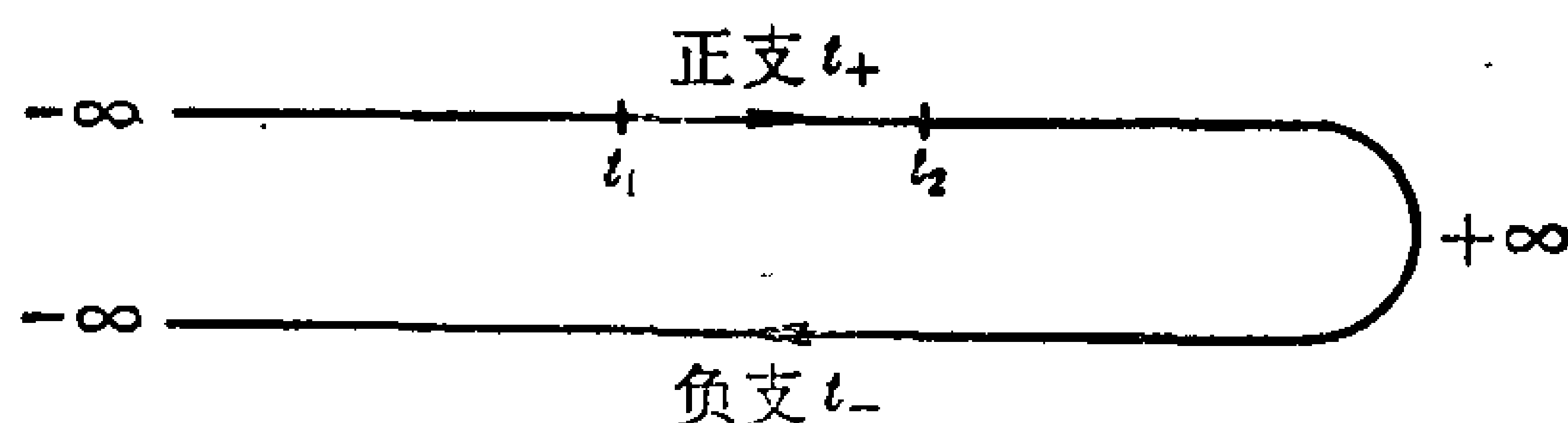


图 2.7

$t=-\infty$出发($S(\infty,-\infty)$中的$-\infty$) 沿 t 轴到 $t=+\infty$ ($S(\infty,-\infty)$中的$+\infty$)，再由 $t=+\infty$($S(-\infty,+\infty)$中的$+\infty$)沿 t 轴返回 $t=-\infty$($S(-\infty,+\infty)$ 中的$-\infty$). 令 T_C 代表沿闭路 C 的时间排序算子：在由 $t=-\infty$到 $t=+\infty$ 这段路径上(简称正支，用符号 t_+ 表示)t 大的算子排在左面，在由 $t=+\infty$ 回到$t=-\infty$ 的路径上(简称负支，用符号 t_- 表示)t 小的算子排在左面，t_-分支上的算子排在 t_+ 分支上的算符的左边. 定义

$$S_C=T_C\left\{\exp\left[-\mathrm{i}\int_C\hat{H}_1(t)\mathrm{d}t\right]\right\} \tag{2.7.12}$$

其中积分沿回路 C 进行. S_C 称为闭路 S 矩阵. S_C 也可以写为

$$S_C=S(-\infty,+\infty)S(+\infty,-\infty) \tag{2.7.13}$$

其中 $S(-\infty,+\infty)$中的算符在 t_- 分支上,$S(+\infty,-\infty)$ 中的算符在 t_+分支上. 算符要根据 T_C 的定义排列次序. 可以看出, 因子 $S(-\infty,+\infty)$的出现将在微扰论中引入新的项.

利用(2.7.12)式可将(2.7.5)式写为

$$\mathrm{Tr}\{\rho \mathrm{T}[\hat{A}_\mathrm{H}(t_1)\hat{B}_\mathrm{H}(t_2)]\}=\mathrm{Tr}\{\rho_0 T_C[\hat{A}_\mathrm{I}(t_1)\hat{B}_\mathrm{I}(t_2)S_C]\} \tag{2.7.14}$$

单粒子实时格林函数的定义中时间 t_1、t_2 都在 t_+分支上, 因而应该写为

$$\begin{aligned}\mathrm{i}G(1_+,1'_+)&=\mathrm{Tr}\{\rho T_c[\hat{\psi}_\mathrm{H}(1_+)\hat{\psi}^+_\mathrm{H}(1'_+)]\}\\&=\mathrm{Tr}\{\rho_0 T_C[\hat{\psi}_\mathrm{I}(1_+)\hat{\psi}^+_\mathrm{I}(1'_+)S_C]\}\end{aligned} \tag{2.7.15}$$

其中 1_+ 代表$(\boldsymbol{x}_1,t_1)$及自旋,并表示 t_1 在 t_+ 分支上,余类推. 用 Wick 定理将 T_C 乘积展开为各种可能的收缩的乘积时会遇到不同形式的收缩: 如 t_+分支上各算符的收缩, t_- 分支上各算符的收缩以及 t_+ 分支上的算符与 t_- 分支上的算符的收缩等等. 因此需要引入下列各种格林函数:

$$\begin{aligned}G^{++}(1,2)&=-\mathrm{i}\langle T_C[\hat{\psi}_\mathrm{H}(1_+)\hat{\psi}^+_\mathrm{H}(2_+)]\rangle\\&=-\mathrm{i}\langle T[\hat{\psi}_\mathrm{H}(1_+)\hat{\psi}^+_\mathrm{H}(2_+)]\rangle\end{aligned} \tag{2.7.16}$$

$$\begin{aligned}G^{--}(1,2)&=-\mathrm{i}\langle T_C[\hat{\psi}_\mathrm{H}(1_-)\hat{\psi}^+_\mathrm{H}(2_-)]\rangle\\&=-\mathrm{i}\langle \tilde{T}[\hat{\psi}_\mathrm{H}(1_-)\hat{\psi}^+_\mathrm{H}(2_-)]\rangle\end{aligned} \tag{2.7.17}$$

以及时间变量不在同一时间分支上的格林函数:

$$\begin{aligned}G^{+-}(1,2)&=-\mathrm{i}\langle T_C[\hat{\psi}_\mathrm{H}(1_+)\hat{\psi}^+_\mathrm{H}(2_-)]\rangle\\&=\mp\mathrm{i}\langle \hat{\psi}^+_\mathrm{H}(2)\hat{\psi}_\mathrm{H}(1)\rangle\end{aligned} \tag{2.7.18}$$

$$\begin{aligned}G^{-+}(1,2)&=-\mathrm{i}\langle T_C[\hat{\psi}_\mathrm{H}(1_-)\hat{\psi}^+_\mathrm{H}(2_+)]\rangle\\&=-\mathrm{i}\langle \hat{\psi}_\mathrm{H}(1)\hat{\psi}^+_\mathrm{H}(2)\rangle\end{aligned} \tag{2.7.19}$$

$G^{+-}(1,2)$在文献中又记为 $G^<(1,2)$,$G^{-+}(1,2)$又记为 $G^>(1,2)$. G^{+-} 正是单粒子密度矩阵

$$\mp\mathrm{i}G^{+-}(\boldsymbol{x}_1t,\boldsymbol{x}_2t)=Nn(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2;t) \tag{2.7.20}$$

$t_1=t_2$ 时 G^{+-} 与 G^{-+} 有以下关系

$$\mathrm{i}[G^{-+}(\boldsymbol{x}_1 t, \boldsymbol{x}_2 t) - G^{+-}(\boldsymbol{x}_1 t, \boldsymbol{x}_2 t)] = \delta(x_1 - x_2) \tag{2.7.21}$$

利用费密子算符或玻色子算符的对易关系可以证明此式。利用以上定义还可证明

$$G^{++}(1,2) = \theta(t_1 - t_2) G^{-+}(1,2) + \theta(t_2 - t_1) G^{+-}(1,2)$$

$$G^{--}(1,2) = \theta(t_1 - t_2) G^{+-}(1,2) + \theta(t_2 - t_1) G^{-+}(1,2)$$

四个格林函数不是相互独立的，由以上定义可以证明

$$G^{++} + G^{--} = G^{+-} + G^{-+} \tag{2.7.22}$$

函数 G^{--} 和 G^{++} 是反厄米共轭的，即

$$G^{++}(x_1, x_2) = -G^{--}(x_2, x_1)^* \tag{2.7.23}$$

函数 G^{-+}、G^{+-} 之间也有反厄米关系

$$\begin{aligned} G^{+-}(x_1, x_2) &= -G^{-+}(x_2, x_1)^* \\ G^{-+}(x_1, x_2) &= -G^{+-}(x_2, x_1)^* \end{aligned} \tag{2.7.24}$$

这些格林函数通称为闭路格林函数，可用下面的公式统一表示.

$$\begin{aligned} G(x_1, x_2) &= -\mathrm{i}\mathrm{Tr}\{\hat{\rho} T_c[\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(x_1) \hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}}(x_2)]\} \\ &= -\mathrm{i}\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_0 T_c[\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(x_1) \hat{\psi}^{+}_{\mathrm{I}}(x_2) S_{\mathrm{C}}\} \end{aligned} \tag{2.7.25}$$

闭路格林函数的时间变量 t_1 和 t_2 可以位于闭路 C 的任一分支上，(t_1, t_2) 的不同排列对应于前面的 4 种不同的格林函数. 求物理量的平均值时 $G(x_1, x_2)$ 的时间只需取在 C 的正支 t_+ 上，但对费曼图的顶角作时间积分时，需要对整个回路积分，因而需要研究整个闭路 C 上不同形式的格林函数.

闭路格林函数与§2-5 中引入的推迟和超前格林函数之间的关系对下面的讨论很重要，将用 G^{R} 和 G^{A} 化简闭路格林函数的 Dyson 方程. G^{R}、G^{A} 的定义是

$$\begin{aligned} G^{\mathrm{R}}(x_1, x_2) &= -\mathrm{i}\theta(t_1 - t_2) \langle [\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(x_1) \hat{\psi}^{-}_{\mathrm{H}}(x_2) \mp \hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}}(x_2) \hat{\psi}_{\mathrm{H}}(x_1)] \rangle \\ G^{\mathrm{A}}(x_1, x_2) &= \mathrm{i}\theta(t_2 - t_1) \langle [\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(x_1) \hat{\psi}_{\mathrm{H}}(x_2) \mp \hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}}(x_2) \hat{\psi}_{\mathrm{H}}(x_1)] \rangle \end{aligned} \tag{2.7.26}$$

§ 2.5中已经证明

$$G^{A}(x_1,x_2)=G^{R}(x_2,x_1)^* \tag{2.7.27}$$

比较(2.7.16)—(2.7.19)式及(2.7.26)式可以证明

$$\begin{aligned} G^{R}&=G^{++}-G^{+-}=G^{-+}-G^{--} \\ G^{A}&=G^{++}-G^{-+}=G^{+-}-G^{--} \end{aligned} \tag{2.7.28}$$

对于空间均匀且不随时间变化的定态，所有这些函数只依赖于$t=t_1-t_2$和$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2$，可以对这些量作傅氏变换，其傅氏分量满足

$$\begin{aligned} G^{++}(\boldsymbol{k},\omega)&=-[G^{--}(\boldsymbol{k},\omega)]^* \\ G^{A}(\boldsymbol{k},\omega)&=[G^{R}(\boldsymbol{k},\omega)]^* \end{aligned} \tag{2.7.29}$$

对于自由粒子体系，函数$G^{(0)++}$满足方程

$$G_{01}^{-1}G^{(0)++}(1,2)=\delta(x_1-x_2) \tag{2.7.30}$$

G_0^{-1}表示下面的微分算符

$$G_0^{-1}=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu \tag{2.7.31}$$

$\delta(x_1-x_2)$表示

$$\delta(x_1-x_2)=\delta_{\sigma_1,\sigma_2}\delta(t_1-t_2)\delta(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2) \tag{2.7.32}$$

G_{01}^{-1}的角标“1”表示这个算符是对$G^{(0)++}(1,2)$的第一个变量$x_1=(\boldsymbol{x}_1,t_1)$作用的. (2.7.30) 式的证明与零温格林函数运动方程的推导方法完全相同. δ函数是由$t_1=t_2$时$G^{++}(x_1,x_2)$的不连续性引起的. G^{R}、G^{A}有相似的不连续性，因而满足相似的方程. $t_1=t_2$时G^{--}有一个相反符号的不连续性，因而满足

$$G_{01}^{-1}G^{(0)--}(1,2)=-\delta(x_1-x_2) \tag{2.7.33}$$

函数G^{+-}、G^{-+}在$t_1=t_2$处是连续的，因此有

$$\begin{aligned} G_{01}^{-1}G^{(0)-+}(1,2)&=0 \\ G_{01}^{-1}G^{(0)+-}(1,2)&=0 \end{aligned} \tag{2.7.34}$$

下面对理想气体均匀定态计算以上这些零级函数，它们是进行微扰计算的基础. 假定粒子的动量分布是$n_{\boldsymbol{k}}^0$，为了简化公式，

假定$n^0{}_k$与粒子的自旋无关. 对费密子系统,G函数对自旋的关系变为 $G_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}G$, 下面略去 $\delta_{\alpha\beta}$ 和自旋角标. 对自由粒子系统, Heisenberg 绘景中的算符与相互作用绘景中的算符是相同的, 我们有

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}C_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}t+\mu t)} \tag{2.7.35}$$

$$\hat{\psi}^{+}(\boldsymbol{x}t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}C_{\boldsymbol{k}}^{+}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}t+\mu t)}$$

将这些公式代入 $G^{(0)}$函数的定义时必须注意, 只有产生算符与消灭算符的动量相等时,它们的平均值才不等于零,并有

$$\begin{aligned}\langle C_{\boldsymbol{k}}^{+}C_{\boldsymbol{k}}\rangle_0&=n_{\boldsymbol{k}}^{0}\\ \langle C_{\boldsymbol{k}}C_{\boldsymbol{k}}^{+}\rangle_0&=1\pm n^0{}_{\boldsymbol{k}}\end{aligned} \tag{2.7.36}$$

由此可以算出

$$G^{(0)+-}(\boldsymbol{x}t)=\mp\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}n_{\boldsymbol{k}}^{0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu)t]}$$

式中 $t=t_1-t_2,\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2$. 这个公式可以写为

$$G^{(0)+-}(\boldsymbol{x}t)=\mp2\pi\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}\omega}{(2\pi)^4}n_{\boldsymbol{k}}^{0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t]}\ \delta[\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu)]$$

由此得到

$$G^{(0)+-}(\boldsymbol{k},\omega)=\mp2\pi\mathrm{i}n_{\boldsymbol{k}}^{0}\delta[\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu)] \tag{2.7.37}$$

同理可求出

$$G^{(0)-+}(\boldsymbol{k},\omega)=-2\pi\mathrm{i}(1\pm n_{\boldsymbol{k}}^{0})\delta[\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu)] \tag{2.7.38}$$

为了计算 $G^{(0)\mathrm{R}}$可直接利用下面的方程

$$\left[\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right]G^{(0)\mathrm{R}}(\boldsymbol{x}t)=\delta(t)\delta(\boldsymbol{x})$$

用傅氏变换方法求解,并注意到 $G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$是上半平面的解析函数, 即可得到

$$G^{(0)\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{\omega-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}+\mu+\mathrm{i}\delta} \tag{2.7.39}$$

取其复数共轭就得到函数 $G^{(0)A}(\boldsymbol{k},\omega)$. 由(2.7.28) 式可以得到

$$G^{(0)++}(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{\omega-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}+\mu+i\delta}\mp 2\pi \mathrm{i} n_{\boldsymbol{k}}^{0}\delta[\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu)]$$

$$=P\frac{1}{\omega-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}+\mu}+\mathrm{i}\pi(\mp 2n_{\boldsymbol{k}}^{0}-1)\delta[\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\mu)] \qquad (2.7.40)$$

对于平衡系统，$n_{\boldsymbol{k}}^{0}$是费密分布或玻色分布函数，$G^{(0)}$是 T 和 μ 的函数

二、闭路格林函数的微扰展开

下面讨论单粒子闭路格林函数的微扰展开. 假定 $\hat{H}$ 可分为两部分

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$$

$\hat{H}_1$代表粒子之间的相互作用或粒子与外场的相互作用. 闭路格林函数在相互作用绘景中可以写为

$$\mathrm{i}G(1,2)=\left\langle T_c\left\{\exp\left[-\mathrm{i}\int_C \mathrm{d}t\hat{H}_1(t)\right]\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(1)\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(2)\right\}\right\rangle_0 \qquad (2.7.41)$$

将其写为级数形式则有

$$\mathrm{i}G(1,2)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_C \mathrm{d}t_1\cdots\int_C \mathrm{d}t_n\langle T_C[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(1)\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(2)]\rangle_0 \qquad (2.7.42)$$

与零温格林函数的展开式比较可以看出，二者的形式完全相同. 应用于有限温度的 Wick 定理现在也成立. 像 $T=0$K 的图解法一样，只需要考虑相连图的贡献. 用低级图可以证明，不相连的真空极化图相互抵消，在高级项中也是如此. 零温格林函数的费曼图规则对闭路格林函数也是适用的. 其差别是，对闭路格林函数，每个顶点对时间的积分是对闭路 C 的积分. 以粒子与外场的相互作用为例，相互作用哈密顿量是

$$\hat{H}_1(t)=\int \mathrm{d}^4x\hat{\psi}^+(x)U(x)\hat{\psi}(x) \tag{2.7.43}$$

$T=0$K 时单粒子格林函数的一级修正项是

$$G^{(1)}=\int \mathrm{d}^3x_3\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_3G^{(0)}(x_1-x_3)U(x_3)G^{(0)}(x_3-x_2) \tag{2.7.44}$$

其费曼图是

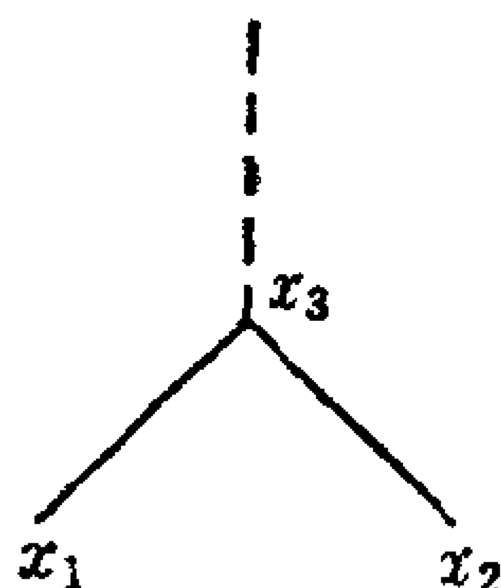


图 2.8

现在计算上述 $\hat{H}_1$ 对闭路格林函数 $G^{++}(1,2)$ 的一级修正 $G^{(1)++}(1,2)$. 根据以上讨论，只要将(2.7.44) 式中对时间的积分改为对闭路 C 的积分即可. 因此我们得到

$$G^{(1)++}(1,2)=\int \mathrm{d}^3x_3\int_C \mathrm{d}t_3G^{(0)}(1_+,3)U(3)G^{(0)}(3,2_+) \tag{2.7.45}$$

实际计算时要将对闭路 C 的积分变为通常的积分，即将 (2.7.45) 式变为

$$\begin{aligned}G^{(1)++}(1,2)&=\int \mathrm{d}^3x_3\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_3G^{(0)}(1_+,3_+)U(3)G^{(0)}(3_+,2_+)\right.\\&\left.+\int_{+\infty}^{-\infty}\mathrm{d}t_3G^{(0)}(1_+,3_-)U(3)G^{(0)}(3_-,2_+)\right\}\\&=\int \mathrm{d}^3x_3\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t_3\{G^{(0)++}(1,3)U(3)G^{(0)++}(3,2)\\&-G^{(0)+-}(1,3)U(3)G^{(0)-+}(3,2)\}\end{aligned} \tag{2.7.46}$$

把沿时间迴路 C 的积分变为从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 的积分时，迴路 C 的负支 t_- 要引入一个 (-1) 因子，或者说分支 t_- 上的相互作用 $\hat{H}_1(t)$

带有 (-1) 因子. 对于高级项及其它类型的相互作用也可以作类似的分析.

像零温格林函数和松原函数的图解法那样，引入自能 Σ 则闭路格林函数可写为

$$G(1,2)=G^{(0)}(1,2)+\int d3d4G^{(0)}(1,3)\Sigma(3,4)G^{(0)}(4,2) \quad (2.7.47)$$

Σ 是所有自能图形的和. 引入不可约自能 Σ^*，则 (2.7.47)变为

$$G(1,2)=G^{(0)}(1,2)+\int d3d4G^{(0)}(1,3)\Sigma^*(3,4)G(4,2) \quad (2.7.48)$$

式中对时间是沿闭路 C 积分的. (2.7.48)式就是闭路格林函数的 Dyson 方程. 本节其余部分仍用 Σ 表示不可约自能.

也可以用下面的方法直接得到闭路格林函数的费曼图，其中对时间的积分是从 $-\infty$ 到 $+\infty$，而不是对迴路 C 的积分. 由 (2.7.13)式

$S_c=S(-\infty,+\infty)S(+\infty,-\infty)=S^+(+\infty,-\infty)S(+\infty,-\infty)$
将 $S(-\infty,\ +\infty)$、$S(+\infty,\ -\infty)$展开成级数代入 (2.7.15)或 (2.7.25)式，我们得到各种项的求和，其中每一项用 Wick 定理计算，每个 ψ 算符对的收缩用一定的图形表示. 如果一个相连图中所有的收缩都是由因子 $T\hat{\psi}(x_1)\hat{\psi}^+(x_2)S(\infty,-\infty)$ 中得到的，则我们得到和 $T=0$K 时相同的图，但每条线的物理意义不同. 其它项的收缩包括 S^+ 中的 ψ 算符. 作微扰展开时应该注意：(a) 在 S^+ 中相互作用算符出现的形式是 $+i\hat{H}_1(t)$，而 S 中是 $-i\hat{H}_1(t)$；(b) 所有 S^+ 中的 ψ 算符标为 $\psi(\boldsymbol{x},t_-)$ 并排在 S 中的算符 $\psi(\boldsymbol{x}t_+)$ 的左边；(c) S^+ 中的算符是反编时的($\widetilde{T}$)，S 中的算符是编时的(T).
仍考虑费密子系统，假定 $\hat{H}_1(t)$ 是粒子在外场中的势能，即(2.7.43)式. (2.7.15)式的一级修正项是

$$\left\langle T\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(x_1)\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(x_2)\left[-\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x_3\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(x_3)U(x_3)\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(x_3)\right]\right\rangle$$

$$+\left\langle \tilde{T}\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x_3\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(x_3)U(x_3)\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(x_3)T\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(x_1)\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(x_2)\right\rangle$$

其中第二项是新出现的，零温格林函数只包括第一项.(2.7.15)式的定义中 $\psi_{\mathrm{I}}(1)$、$\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(2)$都在 t_+ 分支上，所以第一项的四个算符都在T乘积中，它们的成对收缩是

$$T\{\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(1_+)^{\cdot\cdot}\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(2_+)^{\cdot}[-\mathrm{i}\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(3_+)^{\cdot\cdot}U(3)\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(3_+)^{\cdot}]\} \tag{2.7.49}$$

我们得到因子 $G^{(0)++}(1,3)$和 $G^{(0)++}(3,2)$. 第二项要根据上述第二条规则编时并按 Wick 定理展开,

$$\tilde{T}[\mathrm{i}\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(3_-)^{\cdot}U(3)\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(3_-)^{\cdot\cdot}]T[\hat{\psi}_{\mathrm{I}}(1_+)^{\cdot}\hat{\psi}_{\mathrm{I}}^{+}(2_+)^{\cdot\cdot}] \tag{2.7.50}$$

它们的收缩给出因子 $G^{(0)-+}(3,2)$和 $G^{(0)+-}(1,3)$.

费曼图的标法也与普通图解法不同. 在每条线的终点要标出它属于 t_+ 还是 t_- 分支. 如势标为

$$\underset{-}{- - - -\bullet} = +\mathrm{i}U(x),\quad \underset{+}{- - - -\bullet} = -\mathrm{i}U(x)$$

图 2.9

G 函数线的两端也要标出其时间分量属于那个时间分支，如

$1^+ \longleftarrow 2^+ = \mathrm{i}G^{(0)++}(1,2)$, $1^+ \longleftarrow 2^- = \mathrm{i}G^{(0)+-}(1,2)$

$1^- \longleftarrow 2^- = \mathrm{i}G^{(0)--}(1,2)$, $1^- \longleftarrow 2^+ = \mathrm{i}G^{(0)-+}(1,2)$

图 2.10

(2.7.49)式、(2.7.50)式两项可用图表示为

图 2.11

粒子线的两端都标出“+”，说明这是对 $iG^{(1)++}$的修正. 对图中顶角的变量积分得到 $iG^{(1)++}$ 的解析式为

$$iG^{(1)++}(1,2)=\int\{iG^{(0)++}(1,3)iG^{(0)++}(3,2)(-iU(3))$$
$$+iG^{(0)+-}(1,3)iG^{(0)-+}(3,2)iU(3)\}d^4x_3$$

或

$$G^{(1)++}(1,2)=\int d^3x_3\int_{-\infty}^{\infty}dt_3\{G^{(0)++}(1,3)G^{(0)++}(3,2)U(3)$$
$$-G^{(0)+-}(1,3)G^{(0)-+}(3,2)U(3)\} \tag{2.7.51}$$

与(2.7.46)式一致.

二级微扰展开中对 G^{++} 的修正有 4 个图，图中略去了数字角标.

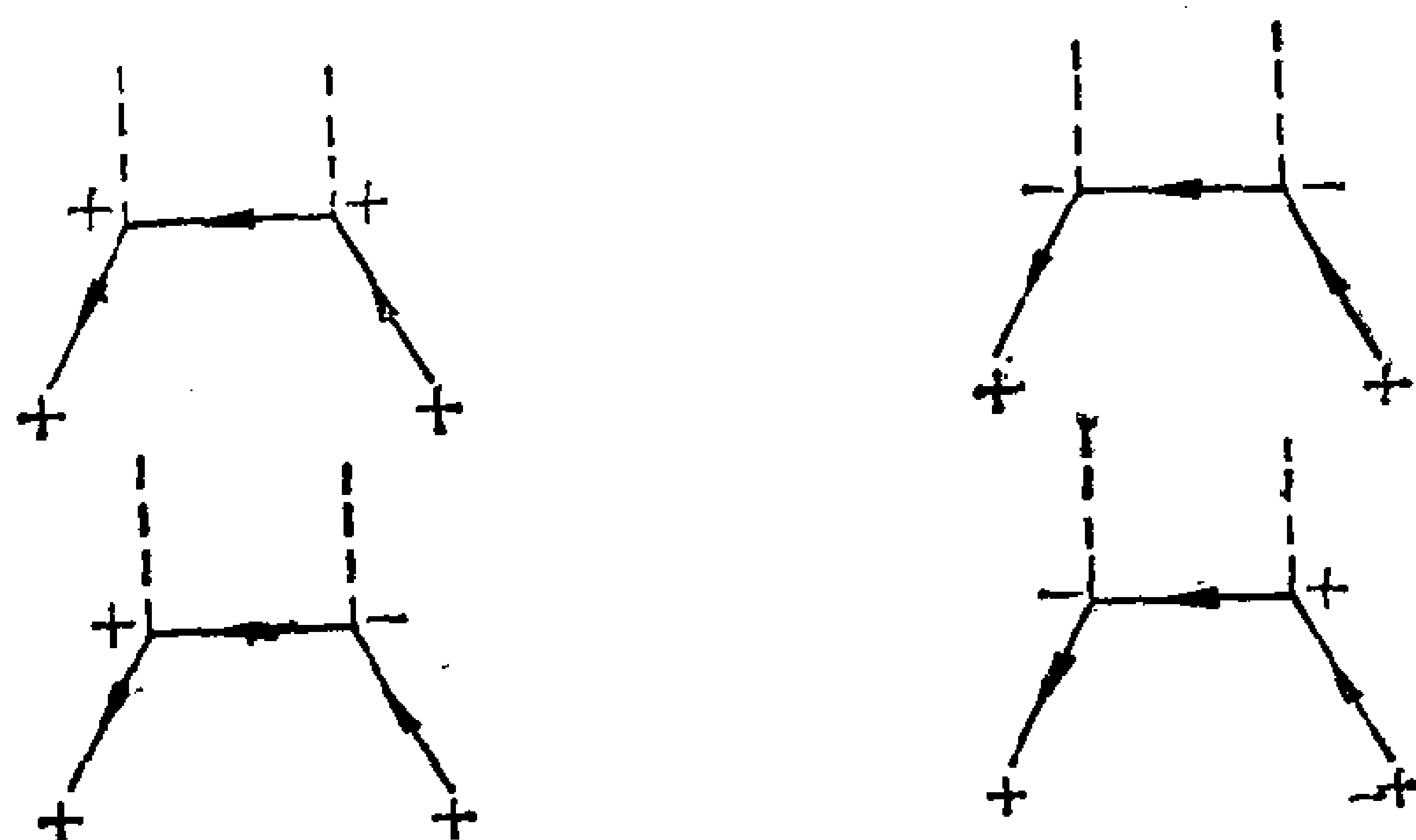


图 2.12

对其它 G 函数的修正也可用图形表示. 如对 G^{+-} 的一级修正有以下两个图



图 2.13

由以上例子可以看出，将零温格林函数或松原函数的费曼图的顶角和自由端以各种可能的方式标上附加的“+”或“−”就可得到闭路格林函数的费曼图. 这个规则对其它类型的相互作用也是适用的. 对于有二体相互作用的多粒子体系，在普通的图解法中相互作用势用波纹线表示. 现在于波纹线的两端加一对“+”号或一

$$1^{+}\ \text{〰〰〰}\ 2^{+} = -\mathrm{i}U(x_1-x_2) \equiv -\mathrm{i}\delta(t_1-t_2)U(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)$$

$$1^{-}\ \text{〰〰〰}\ 2^{-} = \mathrm{i}U(x_1-x_2)$$

图 2.14

对“−”号如上图. 注意波纹线的两端不能一端标“+”另一端标“−”. G^{++}的一级修正项有以下 4 个图，而 $T=0\mathrm{K}$ 时只有两个图.

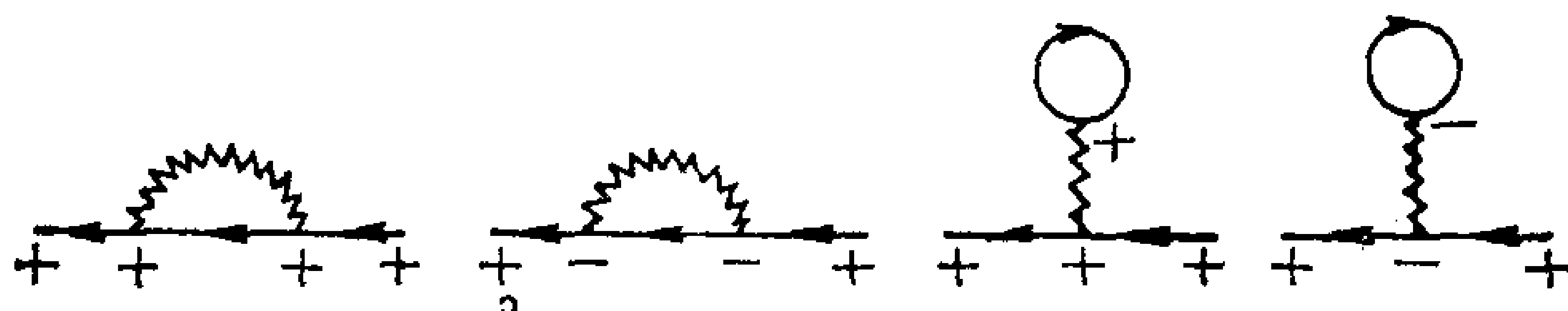


图 2.15

闭路格林函数的图解法也可以应用于 $T>0$ 时的平衡态系统. 假定没有外场，这时可由坐标空间变换到动量空间，每条粒子线代表 $G^{(0)}(k)$，每条虚线代表 $V(q)$. $T=0\mathrm{K}$ 时费密分布函数是

$$n_{\boldsymbol{k}}^{0}=\begin{cases}1, & |\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}\\ 0, & |\boldsymbol{k}|>k_{\mathrm{F}}\end{cases}$$

因此，从(2.7.37)式、(2.7.38)式，对 $T=0\mathrm{K}$ 的费密子系统

$$G^{(0)+-}(k)=0, \qquad |\boldsymbol{k}|>k_{\mathrm{F}}$$

$$G^{(0)-+}(k)=0, \qquad |\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}$$

$G^{(0)+-}(k)$与$G^{(0)-+}(k)$相乘有因子$\theta(|\boldsymbol{k}|-k_{\mathrm{F}})\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|)=0$，因而使(2.7.51)的第二项等于零. G^{++}的高级修正项中凡有顶角“−”

号的也全部等于零．因此闭路格林函数的图直接化简到 $T=0\mathrm{K}$ 时平衡态的图．

Σ 代表所有不可约自能图形的和．根据以上分析其两端应分别标以"＋"或"－"，共有四种可能的标法，即 Σ^{++}、Σ^{--}、Σ^{+-}、Σ^{-+}．因此准确格林函数可以用不可约自能函数表示为

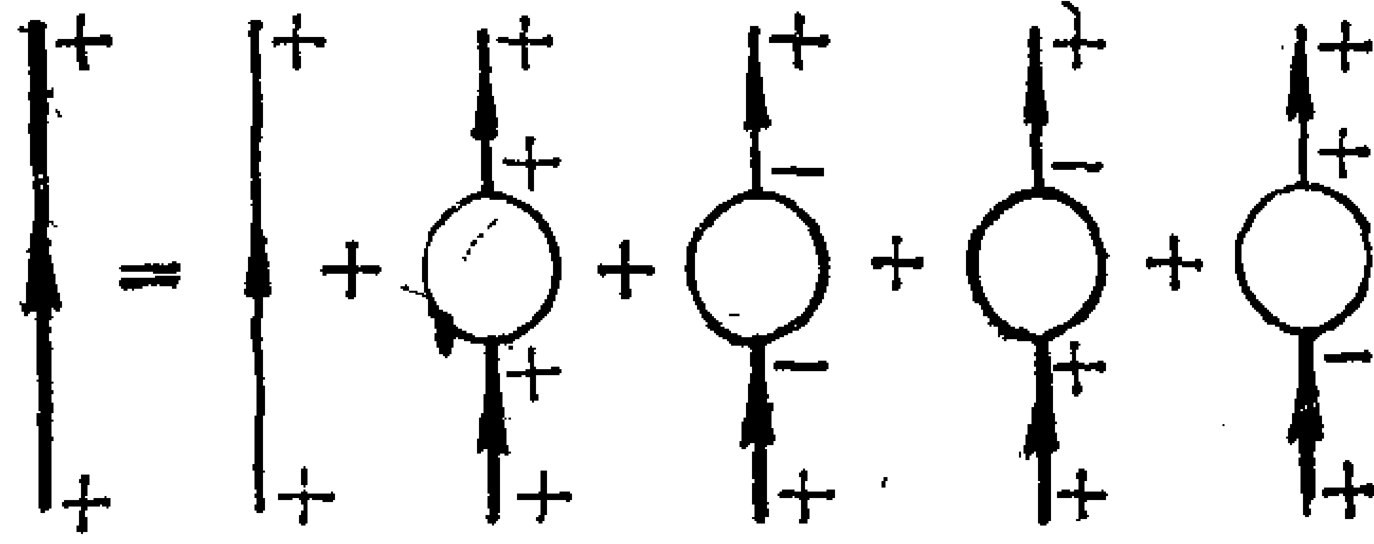


图 2.16

对其它闭路格林函数也可以画出类似的图形．粗线代表准确格林函数，椭圆代表自能．图 2-16 的解析式为

$$G^{++}(1,2)=G^{(0)++}(1,2)+\int \mathrm{d}^4x_3\mathrm{d}^4x_4\{G^{(0)++}(1,4)\Sigma^{++}(4,3)G^{++}(3,2)$$
$$+G^{(0)+-}(1,4)\Sigma^{--}(4,3)G^{-+}(3,2)+G^{(0)+-}(1,4)\Sigma^{-+}(4,3)$$
$$G^{++}(3,2)+G^{(0)++}(1,4)\Sigma^{+-}(4,3)G^{-+}(3,2)\} \tag{2.7.52}$$

其它三个闭路格林函数也有类似的方程．这些方程可以用矩阵表示．定义

$$G=\begin{pmatrix} G^{++} & G^{+-} \\ G^{-+} & G^{--} \end{pmatrix},\qquad \Sigma=\begin{pmatrix} \Sigma^{++} & \Sigma^{+-} \\ \Sigma^{-+} & \Sigma^{--} \end{pmatrix} \tag{2.7.53}$$

则(2.7.52)式那样的 4 个方程可以写为矩阵形式

$$G(1,2)=G^{(0)}(1,2)+\int \mathrm{d}^4x_3\mathrm{d}^4x_4 G^{(0)}(1,4)\Sigma(4,3)G(3,2) \tag{2.7.54}$$

式中对时间的积分为 $\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t(\cdots)$．$G$ 和 Σ 应理解为矩阵．(2.7.54)与(2.7.48)形式上相同但意义不同．(2.7.48)式中的 G 代表

G^{++}、G^{--}、G^{+-}、G^{-+}中的任意一个而(2.7.54)式中的 G 代表矩阵．对时间的积分也不同．(2.7.48)式可以写为(2.7.54)的形式．

理想气体闭路格林函数满足方程(2.7.30)—(2.7.34)式．这些方程也可以写为矩阵形式：

$$G_{01}^{-1}G^{(0)}(1,2)=\sigma_z\delta(x_1-x_2) \tag{2.7.55}$$

其中

$$\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

将 G_{01}^{-1}作用到(2.7.54)式的两边并考虑到(2.7.55)式，我们得到矩阵方程

$$G_{01}^{-1}G(1,2)=\sigma_z\delta(1-2)+\int d^4x_3\sigma_z\Sigma(1,3)G(3,2) \tag{2.7.56}$$

这个方程可以写为另一种形式．在图 2-16 中粗线也可以画在上面，这样每个被积函数变为 $G(1,4)\ \ \Sigma(4,3)G^{(0)}(3,2)$的形式．然后在方程两边作用 G_{02}^{-1*}，得到方程

$$G_{02}^{-1*}G(1,2)=\sigma_z\delta(1-2)+\int d^4x_3G(1,3)\Sigma(3,2)\sigma_z \tag{2.7.57}$$

对有二体相互作用的系统，自能可表示为

$-i\Sigma^{++}=$ [diagrams] $+\cdots$

$-i\Sigma^{+-}=$ [diagrams] $+\cdots$

图 2.17

对Σ^{--}、Σ^{++}有类似的图形. 方程(2.7.54)或(2.7.57) 式就是准确 G 函数的完全方程组.

方程 (2.7.54) 没有考虑闭路格林函数 4 个分量之间的关系(2.7.22). 可进行一次线性变换并利用(2.7.22)式使矩阵的某个元素等于零. 要进行的变换是

$$G' = R^{-1}GR \tag{2.7.58}$$

其中

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad R^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

很容易证明

$$G' = \begin{pmatrix} 0 & G^A \\ G^R & F \end{pmatrix} \tag{2.7.59}$$

其中

$$F = G^{++} + G^{--} = G^{+-} + G^{-+} \tag{2.7.60}$$

若对 $G^{(0)}$和 Σ 也作相同的变换,则方程(2.7.54)保持不变.

矩阵Σ变为

$$\Sigma' = R^{-1}\Sigma R = \begin{pmatrix} \Omega & \Sigma^R \\ \Sigma^A & 0 \end{pmatrix} \tag{2.7.61}$$

其中

$$\Omega = \Sigma^{++} + \Sigma^{--}; \quad \Sigma^R = \Sigma^{++} + \Sigma^{+-}, \Sigma^A = \Sigma^{++} + \Sigma^{-+} \tag{2.7.62}$$

推导中用了下面的公式

$$\Sigma^{++} + \Sigma^{--} = -(\Sigma^{+-} + \Sigma^{-+}) \tag{2.7.63}$$

证明此式的步骤如下: 由(2.7.22)式可以得到

$$G_{01}^{-1}(G^{++} + G^{--} - G^{+-} - G^{-+}) = 0$$

然后将括弧中各格林函数的运动方程代入即可证明(2.7.63)式.

将变换后的方程展开, 我们得到三个方程. 其中 G^A 的方程是

$$G^{A}(1,2)=G^{(0)A}(1,2)+\int d^4x_3 d^4x_4 G^{(0)A}(1,4)\Sigma^{A}(4,3)G^{A}(3,2) \tag{2.7.64}$$

写为矩阵相乘的形式就是

$$G^{A}=G^{(0)A}(1+\Sigma^{A}G^{A})$$

注意，这里的矩阵分量是用坐标“1”和“2”等标记的，矩阵相乘表示对有关坐标的积分．其它的两个方程是

$$G^{R}=G^{(0)R}(1+\Sigma^{R}G^{R})$$

$$F=F^{(0)}(1+\Sigma^{A}G^{A})+G^{(0)R}(\Omega G^{A}+\Sigma^{R}F)$$

根据(2.7.27)式，由 G^{A}的复数共轭可以得到 G^{R}，所以 G^{R}的方程并不给出新的内容．

F 的方程包含 $F^{(0)}$，因为$G_{01}^{-1}F^{(0)}=0$，所以这些项可以消去而得到方程

$$G_{01}^{-1}F(1,2)=\int d^4x_3\{\Omega(1,3)G^{A}(3,2)+\Sigma^{R}(1,3)F(3,2)\} \tag{2.7.65}$$

方程(2.7.64)、和(2.7.65)式原则上可以完全描写非平衡系统的行为．(2.7.65) 式是一个积分-微分方程，是 Boltzmann 方程的推广．(2.7.64)、(2.7.65)式与输运方程的一个基本区别是它们不是包含一个而是包含两个时间变量 t_1 和t_2，在准经典近似下这个差别可以消去．用闭路格林函数可以得到线性响应理论的结果并可处理非线性响应的问题．

参考文献

[1] A. A. 阿布里科索夫，Л. П. 戈尔可夫，И. Е. 加洛辛斯基，统计物理学中的量子场论方法，科学出版社，1963.

[2] A. L. Fetter, J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, MaGraw-Hill, New York. 1971.

[3] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York, 1981.
[4] Д. Н. 祖巴列夫,非平衡统计热力学,高等教育出版社,1982.
[5] L. V. Keldysh, *JETP*, **20** (1965), 1018.
[6] R. Graig, *J. Math. Phys.*, **9** (1968), 605.
[7] 周光召,苏肇冰,统计物理学进展,科学出版社,1981,第 5 章.
[8] 蔡建华等,量子统计的格林函数理论,1982.

第三章　相互作用电子气

固体中电子之间的库仑作用是很强的. 在金属中若两个电子的距离为平均原子间距离，则库仑作用能约为 1 ry. 它与动能或费密面上电子的能带能量有相同的数量级. 而且库仑势是长程势. 但固体中电子的行为与近似独立粒子或准粒子是相同的. 固体物理的一个重要课题就是解释这个事实. 实际上我们观察到的粒子行为是相互作用系统中的准粒子. 本章用格林函数方法讨论相互作用电子气中元激发的基本性质及电子气对外界微扰的响应.

§3.1　简并电子气

假定电子系统处于均匀分布的正电荷基底中，整个系统是电中性的. 这个模型称为凝胶模型，是对实际金属的理想化. 它忽略了正离子势场的周期性，集中研究电子-电子相互作用的多体效应. 本章将不考虑正离子的运动，正离子运动引起的电子-声子相互作用将在第五章中讨论. 本节介绍电子气理论的基本概念.

设电子气处于立方盒子中，盒子边长为 L. 在均匀无限介质中物理性质有平移不变性，因此可用周期性边界条件. 单电子波函数是平面波

$$\psi_{k\lambda}=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\eta_{\lambda} \tag{3.1.1}$$

其中 $V=L^3$ 是盒子的体积. η_λ 是自旋波函数，向上($\uparrow$)和向下($\downarrow$)是相对 z 轴而言的.

$$\eta_{\uparrow}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\qquad \eta_{\downarrow}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

周期边界条件使波矢取以下的值

$$k_i=\frac{2\pi n_i}{L},\qquad i=x,y,z,n_i=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{3.1.2}$$

总哈密顿量可写为三项之和

$$\hat{H}=\hat{H}_{\mathrm{el}}+\hat{H}_{\mathrm{b}}+\hat{H}_{\mathrm{el-b}} \tag{3.1.3}$$

其中

$$\hat{H}_{\mathrm{el}}=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_j^2}{2m}+\frac{1}{2}\mathrm{e}^2\sum_{i\neq j}\frac{\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|} \tag{3.1.4}$$

是电子的哈密顿量.

$$\hat{H}_{\mathrm{b}}=\frac{1}{2}\mathrm{e}^2\iint\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\frac{n(\boldsymbol{x})n(\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \tag{3.1.5}$$

是正电荷基底的能量, $n(\boldsymbol{x})$ 是正离子密度.

$$\hat{H}_{\mathrm{el-b}}=-\mathrm{e}^2\sum_{i=1}^{N}\int\mathrm{d}^3x\frac{n(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i|} \tag{3.1.6}$$

是电子和正电荷基底相互作用的能量. 以上公式中电子坐标用 $\boldsymbol{r}_i$ 表示, 正离子坐标用 $\boldsymbol{x}$ 表示. 我们引入了收敛性因子 μ, 使积分有确定值. 假若没有收敛因子, 由于库仑势的长程性质, 取热力学极限时, 即取 $N\to\infty$、$V\to\infty$ 但 $n=N/V$ 等于常数时, (3.1.3)式中每一项都是无穷大. 但系统是一个物理实在, 发散是不合理的. 我们在计算时取 $\mu\neq0$, 作完计算后先取热力学极限, 最后令 $\mu=0$. 这等价于假定在计算的每一步 $\mu^{-1}\ll L$, 它使我们进行积分时可以移动积分原点并忽略表面修正. (3.1.3)中唯一的动力学变量是电子的变量, 正电荷基底是静止的, $\hat{H}_{\mathrm{b}}$ 是一个常数. 正电荷密度 $n(\boldsymbol{x})=N/V$. $\hat{H}_b$ 可计算如下

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\mathrm{b}}&=\frac{1}{2}\mathrm{e}^2\left(\frac{N}{V}\right)^2\iint\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\frac{\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\\&=\frac{1}{2}\mathrm{e}^2\left(\frac{N}{V}\right)^2\int\mathrm{d}^3x\int\mathrm{d}^3z\frac{\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{z}|}}{|\boldsymbol{z}|}=\frac{1}{2}\mathrm{e}^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}\end{aligned} \tag{3.1.7}$$

上式中我们利用平移不变性移动了原点. 当 $\mu\to0$ 时 $\hat{H}_{\mathrm{b}}/N$ 是发

散的，因为长程库仑作用允许每个电荷元与所有其它电荷元相互作用.

同理可求得

$$\hat{H}_{\text{el-b}}=-\mathrm{e}^2\sum_{i=1}^{N}\frac{N}{V}\int \mathrm{d}^3x\frac{\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i|}$$

$$=-\mathrm{e}^2\sum_{i=1}^{N}\frac{N}{V}\int \mathrm{d}^3z\frac{\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{z}|}}{|\boldsymbol{z}|}=-\mathrm{e}^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2} \quad (3.1.8)$$

$\hat{H}_{\text{el-b}}$ 也是一个常数. 总哈密顿量简化为

$$\hat{H}=-\frac{1}{2}\mathrm{e}^2\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}+\hat{H}_{\text{el}} \quad (3.1.9)$$

所有重要的物理效应包含在 $\hat{H}_{\text{el}}$ 中. 将(3.1.9)重新用二次量子化的形式写出. 动能项包含矩阵元

$$\langle \boldsymbol{k}_1\lambda_1|\hat{T}|\boldsymbol{k}_2\lambda_2\rangle=\frac{1}{2mV}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{x}}\eta^+_{\lambda_1}(-\nabla^2)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{x}}\eta_{\lambda_2}$$

$$=\frac{k_2{}^2}{2mV}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_1)\cdot\boldsymbol{x}}$$

$$=\frac{k_2{}^2}{2m}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\delta_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2}$$

动能算符是

$$\hat{T}=\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\frac{k^2}{2m}C^+_{\boldsymbol{k}\lambda}C_{\boldsymbol{k}\lambda}$$

将势能也写为二次量子化的形式，我们得到

$$\hat{H}_{\text{el}}=\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\frac{k^2}{2m}C^+_{\boldsymbol{k}\lambda}C_{\boldsymbol{k}\lambda}+\frac{1}{2}\sum_{\substack{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4\\ \lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4}}\langle \boldsymbol{k}_1\lambda_1\boldsymbol{k}_2\lambda_2|V|\boldsymbol{k}_3\lambda_3\boldsymbol{k}_4\lambda_4\rangle$$

$$\times C^+_{\boldsymbol{k}_1\lambda_1}C^+_{\boldsymbol{k}_2\lambda_2}C_{\boldsymbol{k}_4\lambda_4}C_{\boldsymbol{k}_3\lambda_3}$$

$$V(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j)=\frac{\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j|}}{|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j|} \quad (3.1.10)$$

(3.1.10)式中的矩阵元可求出如下：

$$
\begin{aligned}
&\langle \boldsymbol{k}_1\lambda_1\boldsymbol{k}_2\lambda_2|V|\boldsymbol{k}_3\lambda_3\boldsymbol{k}_4\lambda_4\rangle \\
&=\frac{e^2}{V^2}\int \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2\,\frac{\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_1)\cdot\boldsymbol{x}_1+\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_4-\boldsymbol{k}_2)\cdot\boldsymbol{x}_2} \\
&\quad\times\eta^+_{\lambda_1}(1)\eta_{\lambda_3}(1)\eta^+_{\lambda_2}(2)\eta_{\lambda_4}(4)
\end{aligned}
$$

作变量变换 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2$, 这个表示式简化为

$$
\begin{aligned}
&\langle \boldsymbol{k}_1\lambda_1\boldsymbol{k}_2\lambda_2|V|\boldsymbol{k}_3\lambda_3\boldsymbol{k}_4\lambda_4\rangle \\
&=\frac{e^2}{V^2}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_4)\cdot\boldsymbol{x}}\int \mathrm{d}^3y\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_1)\cdot\boldsymbol{y}}\frac{\mathrm{e}^{-\mu|\boldsymbol{y}|}}{|\boldsymbol{y}|}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4} \\
&=\frac{e^2}{V}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4}\delta_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3+\boldsymbol{k}_4}\frac{4\pi}{(\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_3)^2+\mu^2}
\end{aligned}
\tag{3.1.11}
$$

其中自旋的 Kronecker δ 是由自旋波函数的正交性引起的. 第二个Kronecker δ 表示均匀系统中的动量守恒.

总哈密顿量可以写为

$$
\begin{aligned}
\hat{H}=&-\frac{e^2}{2}\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}+\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\frac{k^2}{2m}C^+_{\boldsymbol{k}\lambda}C_{\boldsymbol{k}\lambda} \\
&+\frac{e^2}{2V}\sum_{\boldsymbol{k}_1\lambda_1,\boldsymbol{k}_2\lambda_2,\boldsymbol{k}_3\lambda_3,\boldsymbol{k}_4\lambda_4}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4}\delta_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3+\boldsymbol{k}_4} \\
&\times\frac{4\pi}{|\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_3|^2+\mu^2}C^+_{\boldsymbol{k}_1\lambda_1}C^+_{\boldsymbol{k}_2\lambda_2}C_{\boldsymbol{k}_4\lambda_4}C_{\boldsymbol{k}_3\lambda_3}
\end{aligned}
\tag{3.1.12}
$$

动量守恒限制了对 $\boldsymbol{k}$ 的求和, 独立变量只有三个. 作变量变换

$$
\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\qquad \boldsymbol{k}_3=\boldsymbol{k}
$$

$$
\boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q},\qquad \boldsymbol{k}_4=\boldsymbol{p}
$$

它满足动量守恒: $\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{k}_3+\boldsymbol{k}_4$. $\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_3=\boldsymbol{q}$ 是电子散射时的动量传递. 用这些新变量可将$\hat{H}$的最后一项写为:

$$
\frac{e^2}{2V}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}}\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2+\mu^2}C^+_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\lambda_1}C^+_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}\lambda_2}C_{\boldsymbol{p}\lambda_2}C_{\boldsymbol{k}\lambda_1}
$$

将 $\boldsymbol{q}=0$ 的项和 $\boldsymbol{q}\neq0$ 的项分别写出, 则有

$$\frac{e^2}{2V}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q}}{}'\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2+\mu^2}C^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\lambda_1}C^+_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\lambda_2}C_{\mathbf{p}_2\lambda_2}C_{\mathbf{k}\lambda_1}$$

$$+\frac{e^2}{2V}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{p}}\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\frac{4\pi}{\mu^2}C^+_{\mathbf{k}\lambda_1}C^+_{\mathbf{p}\lambda 2}C_{\mathbf{p}\lambda_2}C_{\mathbf{k}\lambda_1} \qquad (3.1.13)$$

Σ' 右上方的一撇表示求和中不包括 $\boldsymbol{q}=0$ 的项. 用反对易关系将第二个求和重写为

$$\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}\sum_{\mathbf{k}\lambda_1}\sum_{\mathbf{p}\lambda_2}\left[C^+_{\mathbf{k}\lambda_1}C_{\mathbf{k}\lambda_1}C^+_{\mathbf{p}\lambda_2}C_{\mathbf{p}\lambda_2}-\delta_{\mathbf{k},\mathbf{p}}\delta_{\lambda_1\lambda_2}C^+_{\mathbf{k}\lambda_1}C_{\mathbf{p}\lambda_2}\right]$$

$$=\frac{e^2}{2V}\frac{4\pi}{\mu^2}(\hat{N}^2-\hat{N})$$

对有固定粒子数的体系, 用粒子数 N 代替算符 $\hat{N}$ 则此式可写为

$$\frac{e^2}{2}\frac{N^2}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}-\frac{e^2}{2}\frac{N}{V}\frac{4\pi}{\mu^2}$$

其中第一项抵消了(3.1.12)式中的第一项. 第二项为一能量值, 每个粒子的平均能量为

$$-\frac{4\pi e^2}{2}\frac{1}{V\mu^2}$$

现在取极限, 光取热力学极限然后取 $\mu\to0$, 则此项等于零. 因此 $1/\mu^2$发散性在热力学极限下相互抵消, 它反映了整个体系的电中性条件. 现在可在(3.1.13)式第一项中取 $\mu\to0$, 因为表达式已有确定的值.

这样, 我们得到相互作用电子气的哈密顿量为

$$\hat{H}=\sum_{\mathbf{k}\lambda}\frac{k^2}{2m}C^+_{\mathbf{k}\lambda}C_{\mathbf{k}\lambda}+\frac{e^2}{2V}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q}}{}'\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2}C^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\lambda_1}C^+_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\lambda_2}C_{\mathbf{p}\lambda_2}C_{\mathbf{k}\lambda_1}$$

$$(3.1.14)$$

引入无量纲参量, 定义 r_0 为

$$V=\frac{4}{3}\pi r_0^3N \qquad (3.1.15)$$

r_0 为粒子间的平均距离. Bohr 半径 a_0 的公式为

$$a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}\approx 0.5292\text{Å} \tag{3.1.16}$$

定义 r_s 为上面两个量的比,

$$r_s=\frac{r_0}{a_0} \tag{3.1.17}$$

r_s 是以 a_0 为单位的电子电荷球的平均半径,表示体系中的粒子密度. r_s 越小电子气的密度越大, 电子气的其它性质依赖于参量 r_s. 以 r_0 为长度单位定义下面的量

$$\bar{V}=\frac{V}{r_0^3},\quad \bar{k}=r_0\boldsymbol{k},\quad \bar{p}=r_0\boldsymbol{p},\quad \bar{q}=r_0\boldsymbol{q} \tag{3.1.18}$$

则$\hat{H}$可写为无量纲的形式

$$\hat{H}=\frac{e^2}{a_0 r_s^2}\left[\sum_{\bar{k}\lambda}\frac{1}{2}\bar{k}^2C^+_{\bar{k}\lambda}C_{\bar{k}\lambda}\right.$$

$$\left.+\frac{r_s}{2\bar{V}}\sum_{\bar{k},\bar{p},\bar{q}}{}'\frac{4\pi}{\bar{q}^2}C^+_{\bar{k}+\bar{q}\lambda_1}C^+_{\bar{p}-\bar{q}\lambda_2}C_{\bar{p}\lambda_2}C_{\bar{k}\lambda_1}\right] \tag{3.1.19}$$

此式表明,动能$\propto\frac{1}{r_s^2}$,势能$\propto\frac{1}{r_s}$, 电子气密度很高即r_s很小时电子的动能将大于势能. 这时电子的行为像自由粒子一样, 势能只是对动能的微扰, 因而可用微扰论计算能量的主要项. 在高密度极限, 自由电子图象将是正确的. 本章主要研究这种极限情况. 我们预计基态能量可用小参量 r_s 展开为级数. 仍采用通常的符号,将哈密顿量写为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$$

$$\hat{H}_0=\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\frac{k^2}{2m}C^+_{\boldsymbol{k}\lambda}C_{\boldsymbol{k}\lambda}$$

$$\hat{H}_1=\frac{e^2}{2V}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}}{}'\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\frac{4\pi}{q^2}C^+_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\lambda_1}C^+_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}\lambda_2}C_{\boldsymbol{p}\lambda_2}C_{\boldsymbol{k}\lambda_1} \tag{3.1.20}$$

$\hat{H}_0$是自由电子系统的哈密顿量,$\hat{H}_1$表示电子之间的库仑作用,在高

密度极限下 $\hat{H}_1$可看作微扰.

在相互作用电子气理论中有时将电子系统的哈密顿量用电子密度$\rho(\boldsymbol{r})$的傅氏分量ρ_q表示，以强调密度起伏 ρ_q的重要作用. 电子密度$\rho(\boldsymbol{r})$的定义是

$$\rho(\boldsymbol{r})=\sum_i \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j) \tag{3.1.21}$$

将 ρ写为

$$\begin{aligned}\rho(\boldsymbol{r})&=\sum_j \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j)\\&=\frac{1}{V}\sum_q\sum_j e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j}\\&=\frac{1}{V}\sum_q e^{i\ \cdot\boldsymbol{r}}\sum_j e^{\ \boldsymbol{r}_j\boldsymbol{q}}\end{aligned} \tag{3.1.22}$$

可以看出，$\rho(\boldsymbol{r})$的傅氏分量 ρ_q是

$$\rho_q=\sum_i e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_j},\quad \rho_q^+=\sum_j e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_j}=\rho_{-q} \tag{3.1.23}$$

二次量子化表象中ρ_q、ρ_q^+对应于密度起伏算符. 密度算符的二次量子化形式为(为简单起见暂略去自旋标记)

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(\boldsymbol{r},t)&=\int\Psi^*(\boldsymbol{r}',t)\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}',t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\\&=\Psi^+(\boldsymbol{r},t)\Psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}C_{\boldsymbol{k}}^+C_{\boldsymbol{k}'}e^{-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')}\\&=\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}C_{\boldsymbol{k}}^+C_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}},\qquad(\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}')\end{aligned}$$

由此求得ρ_q、ρ_q^+为(将自旋标出)

$$\hat{\rho}_q=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}C_{\boldsymbol{k}\sigma}^+C_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}C_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}\sigma}^+C_{\boldsymbol{k}\sigma}$$

$$\hat{\rho}_q^+ = \sum_{k\sigma} C_{k+q\sigma}^+ C_{k\sigma} = \hat{\rho}_{-q} \tag{3.1.24}$$

总哈密顿量可写为

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k^0 C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_q{}' V(q) (\hat{\rho}_q^+ \hat{\rho}_q - N) \tag{3.1.25}$$

基态能量可写为

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + \cdots \tag{3.1.26}$$

$E^{(0)}$为自由电子气的基态能量，$E^{(1)}$是一级微扰修正. 自由电子气的基态可用动量空间中各向同性的分布函数 $n^0{}_k = \theta(k_F - |\boldsymbol{k}|)$描写. 基态中总粒子数 $\hat{N}$ 的期望值计算如下

$$N = \langle \Phi_0 | \hat{N} | \Phi_0 \rangle = \sum_{k\lambda} \langle \Phi_0 | \hat{n}_{k\lambda} | \Phi_0 \rangle = \sum_{k\lambda} \theta(k_F - |\boldsymbol{k}|)$$

$$= V \sum_{\Lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \ \theta(\boldsymbol{k}_F - |\boldsymbol{k}|) = \frac{V}{3\pi^2} k^3{}_F$$

它表示费密动量 k_F 与粒子密度 $n = N/V$ 之间的关系. 上式又可写为

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} r_0{}^{-1} \approx 1.92 r_0{}^{-1} \tag{3.1.27}$$

这表明，$k_F{}^{-1}$ 的数值与粒子间距离是很接近的.

$\hat{H}_0$ 的期望值是

$$E^{(0)} = \langle \Phi_0 | \hat{H}_0 | \Phi_0 \rangle = \frac{1}{2m} \sum_{k\lambda} k^2 \langle \Phi_0 | \hat{n}_{k\lambda} | \Phi_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{2m} \sum_{k\lambda} k^2 \theta(k_F - |\boldsymbol{k}|) = \frac{1}{2m} \sum_{\lambda} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k k^2 \theta$$

$$(k_F - |\boldsymbol{k}|)$$

$$= \frac{3}{5} \frac{k^2{}_F}{2m} N = \frac{e^2}{2a_0} \frac{N}{r_s{}^2} \frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}$$

$$= \left(\frac{e^2}{2a_0}\right) N \frac{2.21}{r_s{}^2} \tag{3.1.28}$$

对自由电子气，每个电子的平均基态能量是$\frac{E^{(0)}}{N}=\frac{3}{5}\varepsilon^0{}_F$，$\varepsilon^0{}_F$ 是费米能量.(3.1.28)式也可写为

$$\frac{E^{(0)}}{N}=\frac{2.21}{r_s{}^2}\text{ry} \qquad (3.1.29)$$

$1\,\text{ry}=\frac{e^2}{2a_0}\approx 13.6\text{eV}$，是氢原子基态的结合能.一级微扰能量可求出为

$$E^{(1)}=-\frac{e^2}{2a_0}N\frac{0.916}{r_s} \qquad (3.1.30)$$

这样，在高密度极限下每粒子的基态能量可近似写为

$$\frac{E}{N}\underset{r_s\to 0}{=}\frac{e^2}{2a_0}\left[\frac{2.21}{r_s{}^2}-\frac{0.916}{r_s}+\cdots\right] \qquad (3.1.31)$$

第一项是自由电子气的动能，对高密度极限($r_s\to 0$)它是主要的.第二项是交换能，是负的，是由波函数的反对称性引起的.一级项中还有一项是由直接相互作用引起的，相应于 $\boldsymbol{q}=0$ 的项，已与(3.1.3)式中其它有关的项相抵消，因此(3.1.31)式并不包括此项.这个级数中，其余的项，即…所代表的项称为相关能.

计算相关能的第一步是计算基态能量微扰展开中的二级项，即

$$E^{(2)}=-\sum_n\frac{|\langle n|\hat{H}_1|o\rangle|^2}{E_n-E_0}$$

对 $E^{(2)}$ 的供献有两种过程.第一种是所谓直接过程，由$|n\rangle$回到$|0\rangle$的方法和由$|0\rangle$到$|n\rangle$的方法相同.这里的$|0\rangle$指基态，即(3.1.28)式中的$|\Phi_0\rangle$.这个过程的供献是

$$E_q{}^{(2)}=-4\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{q},\boldsymbol{k}}\left(\frac{4\pi e^2}{\boldsymbol{k}^2}\right)^2\frac{m}{\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k})}n^0_{\boldsymbol{p}}(1-n^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k}})n^0_{\boldsymbol{q}}(1-n^0_{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}}) \qquad (3.1.32)$$

为了简单已取体积$V=1$.动量变量也作了适当变换.式中分布函数的因子表示 Pauli 原理的限制.第二种是所谓交换过程，只

能在平行自旋电子之间发生，其贡献为

$$E_b^{(2)}=2\sum_{p,q,k}\frac{4\pi e^2}{k^2}\frac{4\pi e^2}{(p+q+k)^2}\frac{m}{k\cdot(p+q+k)}$$
$$\times n_p^0(1-n^0_{p+k})n_q^0(1-n^0_{q+k})$$

$E_b^{(2)}$是有限的，$E_a^{(2)}$是发散的.

$$E_a^{(2)}\approx-\int\frac{dk}{k}\approx-\ln k \tag{3.1.33}$$

代入积分下限 $k=0$，$E_a^{(2)}$ 发散. 这个对数发散性与长程库仑作用有关. 如果距离增大时相互作用比库仑势下降得快，则对小的 k，$V(k)$可能接近一个常数，就不出现这种发散.

为了解决这个问题，50 年代初期 Bohm 和 Pines 发展了一种理论，这个理论基于相互作用电子气与经典等离子体的类似上. 其差别在于电子系统的密度非常高而我们研究的温度又很低，因而必须应用量子统计. 所以将低温和金属密度下的电子气称为量子等离子体. Bohm 和 Pines 发现，由于长程库仑作用的结果，量子等离子体表现出合作行为. 这种合作行为表现在两方面：屏蔽和集体振荡.

屏蔽效应可用 Fermi-Thomas 近似进行计算. 若原点有一点电荷 Q，则它在电子气中的势 $\varphi(r)$ 等于

$$\varphi(r)=\frac{Q}{r}e^{-k_{TF}r} \tag{3.1.34}$$

k_{TF} 是 Fermi-Thomas 屏蔽波矢.

$$k_{TF}=\left(\frac{6\pi ne^2}{\varepsilon_F}\right)^{1/2} \tag{3.1.35}$$

这样，电荷 Q 引起介质极化，将 Q 的场屏蔽在 $\lambda_{TF}=k_{TF}^{-1}$的距离内. 对大多数金属，λ_{TF} 为粒子间距的数量级. 因此屏蔽是非常有效的.

集体振荡的存在说明如下：电子在屏蔽等离子体中电荷扰动

的运动中将产生“冲过头”即过屏蔽的现象，于是向相反方向运动，由于惯性又产生“冲过头“的现象，但这次是“欠屏蔽”，这样就形成了电荷的振荡即等离子体振荡. 为了分析这种合作现象需要研究密度扰动 $\rho_{\boldsymbol{k}}$ 的运动方程. 可以证明

$$\ddot{\rho}_{\boldsymbol{k}}+\omega_{\mathrm{pl}}^{2}\rho_{\boldsymbol{k}}=-\sum_{i}\left(\frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}_{i}}{m}+\frac{k^{2}}{2m}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_{i}}-\sum_{\boldsymbol{q}\neq\boldsymbol{k}}\frac{4\pi e^{2}}{mq^{2}}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}\rho_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}\rho_{\boldsymbol{k}} \tag{3.1.36}$$

其中

$$\omega_{\mathrm{pl}}=\left(\frac{4\pi ne^{2}}{m}\right)^{1/2} \tag{3.1.37}$$

ω_{pl} 称为电子气的等离子振荡频率.

若能略去(3.1.36)式右边的两项则电子气中就存在 $\rho_{\boldsymbol{k}}$ 的振荡，其频率是 ω_{pl}. 现在估计这样取的条件. 第一项的数量级是 $k^{2}v_{\mathrm{F}}^{2}\rho_{\boldsymbol{k}}$，$v_{\mathrm{F}}$为费米速度. 第二项包含两个密度扰动的乘积. 因为密度扰动

$$\rho_{\boldsymbol{q}}=\sum_{j}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_{j}}$$

对 $\boldsymbol{q}\neq0$，$\rho_{\boldsymbol{q}}$是指数项的和，而每一项的相位是无规变化的. 可以期望这一项代表小的修正，在一级近似下可以忽略，这种近似称为无规相近似，记为 RPA.

在 RPA 近似下 $\rho_{\boldsymbol{k}}$ 集体振荡的条件是

$$\frac{k^{2}v_{\mathrm{F}}^{2}}{\omega_{\mathrm{pl}}^{2}}\ll1 \quad 或 \quad k^{2}\ll k_{\mathrm{c}}^{2}$$

k_{c}^{2} 的数量级是 $\omega_{\mathrm{pl}}^{2}/v_{\mathrm{F}}^{2}$，因此只对长波($k\ll k_{\mathrm{c}}$)，量子等离子体才表现出集体振荡行为，振荡频率接近 ω_{pl}. 而对短波($k\gg k_{\mathrm{c}}$)，电子气像自由的独立粒子那样，这时 (3.1.36) 式右边的第一项起作用. 典型金属的密度 $n\approx10^{23}$电子/cm^{3}，等离子体振荡的频率≈

2×10^{16}Hz，一个振动量子的能量是

$$\omega_{\text{pl}}\approx12\text{eV}$$

显然不能靠热运动的能量激发等离子体振荡.

现在讨论屏蔽和等离子体振荡这两个概念如何克服相关能计算中二级微扰能量发散引起的困难．将电子气的哈密顿量写为

$$\hat{H}=\sum_i\frac{p_i^2}{2m}+\sum_{k>k_c}\frac{2\pi e^2}{k^2}(\rho_k^+\rho_k-N)+\sum_{k<k_c}\frac{2\pi e^2}{k^2}(\rho_k^+\rho_k-N)$$

第二项代表电子之间的屏蔽相互作用．第三项是相互作用的长程部分，由(3.1.33)式可以看出，正是这部分引起发散．我们已经知道，$k\leqslant k_c$ 时 ρ_k 表现出合作行为，振荡频率是 ω_{pl}．因此我们应当像声波那样用集体坐标描写它．$T=0$K 时振子处于基态，对基态能量的贡献就是零点能．这样，由于存在等离子体振荡，库仑能的长程部分完全冻结起来了，束缚在等离子体的零点振荡中．短程相互作用并不引起发散．在屏蔽库仑作用下电子的运动图象与 Hartree-Fock 近似中的电子运动非常接近.

后来的理论和实验工作都证明 Bohm 和 Dines 的基本概念是正确的．理论上对 RPA 也有不少改进．本章以后几节将要介绍的环图近似就是 RPA.

现在电子气理论仍然只在两个区域比较成功．首先是高密度区域，这时电子动能比它们之间的势能大得多，势能可以当作微扰处理．另一个区域是低密度区域，$r_s\geqslant10$，这时势能比动能大得多，电子密度不是均匀的，电子排列成体心立方晶格，称为 Wigner 晶格．实际金属的 r_s 在 1.8—5.6 之间，即处于中间密度．在此区间还缺乏成功的理论．本章只限于介绍高密度区域的相互作用电子气理论.

§3.2 电子自能

本节计算绝对零度时的电子自能，并讨论准粒子的能量和衰减.

一、环图近似

根据§1.6中的讨论，一级电子自能包括以下两个图. 图3.1(a)中 $V(0)=V(q=0)$. 但哈密顿量中并不包括 $q=0$ 的项，所以

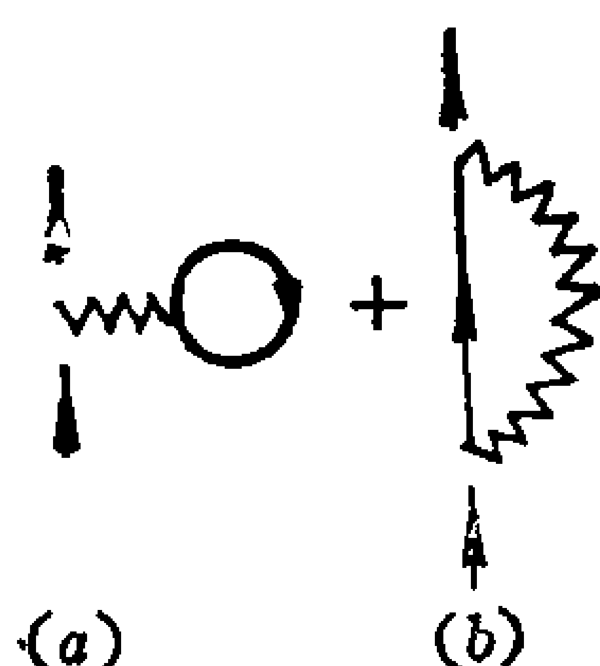


图 3.1

$\Sigma_{(1)}$只包括第二个图的贡献. 根据(1.6.11)式，其贡献为

$$\begin{aligned}\Sigma_{(1)}(\boldsymbol{k}) &= -\int\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|) \\ &= -\int\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}\frac{4\pi e^2}{|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|^2}\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|) \\ &= -\frac{e^2}{\pi}\int_0^{k_{\mathrm{F}}}k'^2\mathrm{d}k'\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}v}{k^2+k'^2-2kk'v} \\ &= -\frac{e^2}{\pi k}\int_0^{k_{\mathrm{F}}}k'\mathrm{d}k'\ln\left|\frac{k+k'}{k-k'}\right| \\ &= -\frac{e^2k_{\mathrm{F}}}{\pi}\left(1+\frac{1-y^2}{2y}\ln\left|\frac{1+y}{1-y}\right|\right)\end{aligned}$$

$$y=k/k_{\mathrm{F}} \tag{3.2.1}$$

$k=k_{\mathrm{F}}$ 时 $y=1$，这时有

$$\Sigma_{(1)}(k_{\mathrm{F}})=-\frac{e^2k_{\mathrm{F}}}{\pi} \tag{3.2.2}$$

(3.2.1)式表明，一级交换自能不依赖于频率. 由 $\Sigma_{(1)}$ 可算出一级近似下的有效质量 m^* 为

$$\frac{m}{m^*}=1+\frac{\partial}{\partial\varepsilon_k^0}\Sigma_{(1)}(k)=1+\frac{m}{k}\frac{\partial}{\partial k}\Sigma_{(1)}(k)$$

$$=\frac{e^2m}{2\pi k_F}\frac{1}{y^2}\left(\frac{1+y^2}{y}\ln\left|\frac{1+y}{1-y}\right|-2\right) \tag{3.2.3}$$

$k=k_F$ 时它是发散的. 有效质量和电子比热容等物理量有关，发散的结果与实验不符合. 因此需要研究高级近似.

二级不可约自能包括下面的费曼图

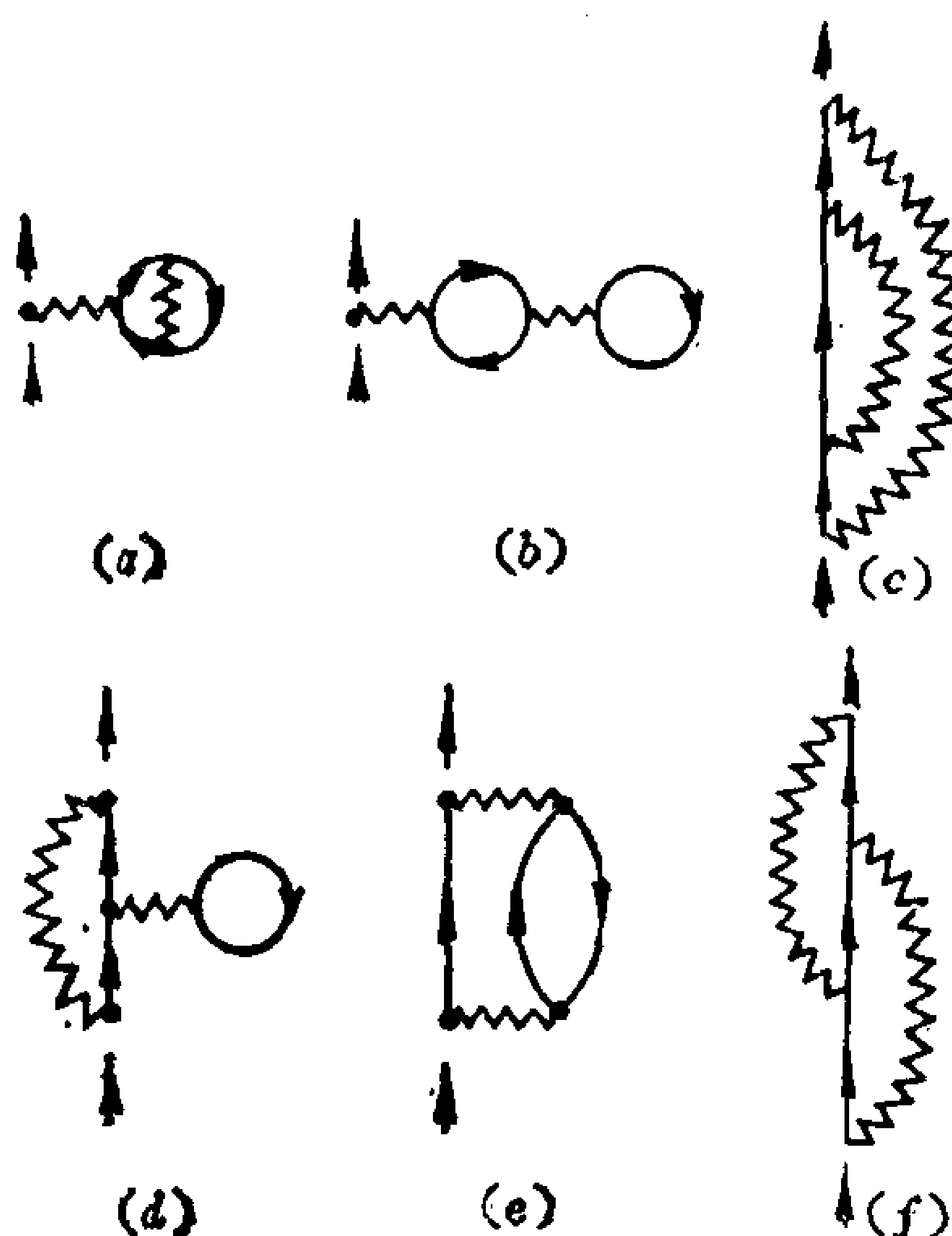


图 3.2

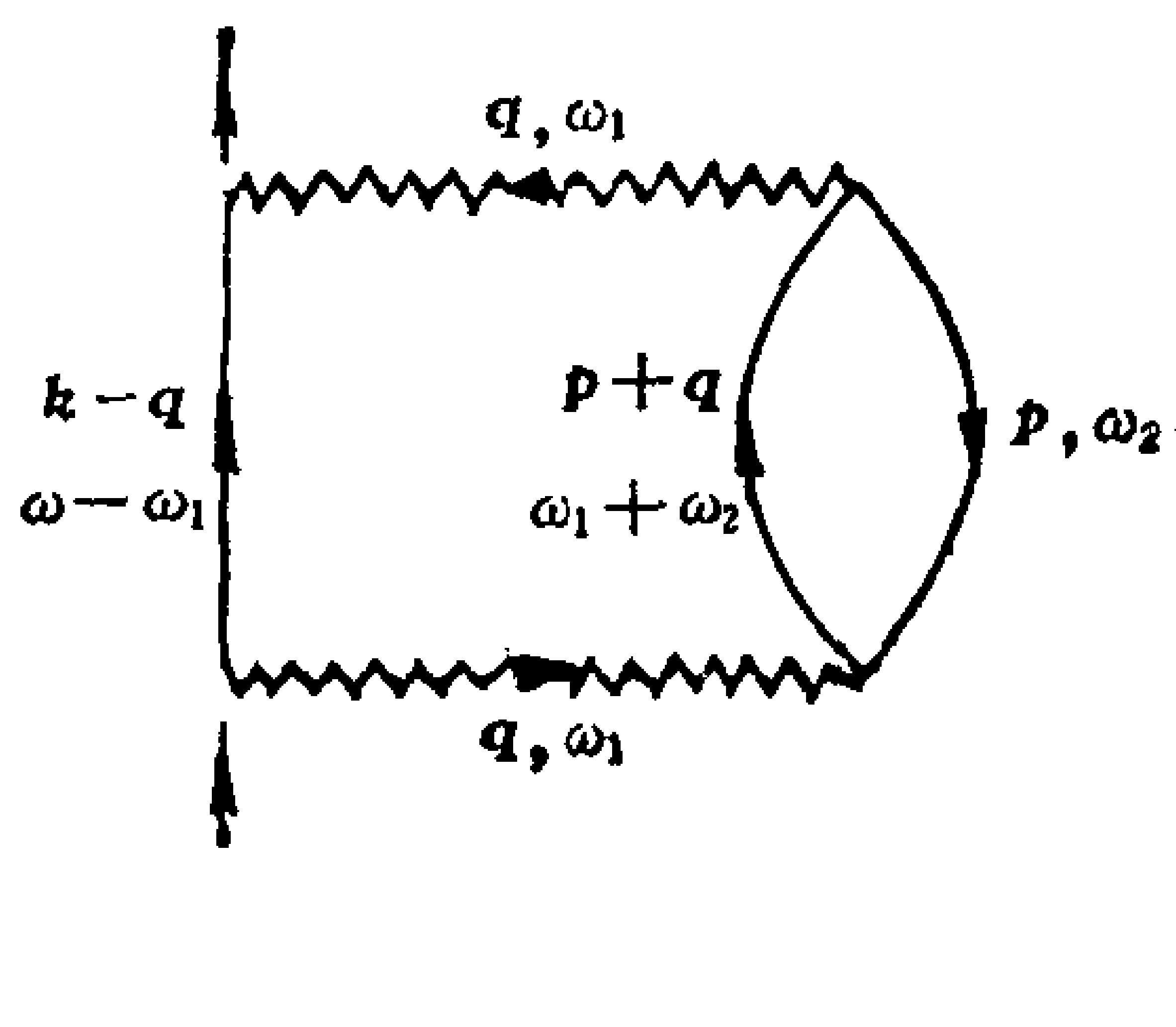


图 3.3

其中(a)、(b)和(d)包含 $\boldsymbol{q}=0$ 的波纹线，所以不包括在电子自能中. (c)和(f)是交换相互作用的贡献，是有限的. 现在讨论图(e)的贡献. 将每条线的动量、频率标出如图 3.3 所示. 其表达式为

$$\Sigma_{2a}(\boldsymbol{k},\omega)=2\int\frac{\mathrm{d}^3q\mathrm{d}^3p\mathrm{d}\omega_1\mathrm{d}\omega_2}{(2\pi)^8}[V(q)]^2G^0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},$$

$$\omega-\omega_1)G^0(\boldsymbol{p},\omega_2)G^0(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q},\omega_1+\omega_2)$$

$$=2\int\frac{d^3q d\omega_1}{(2\pi)^4}[V(q)]^2 G^0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\omega-\omega_1)$$

$$\times\int\frac{d^3p d\omega_2}{(2\pi)^4}G^0(\boldsymbol{p},\omega_2)G^0(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q},\omega_1+\omega_2) \tag{3.2.4}$$

对 ω_2 积分时被积函数中两个 G^0 函数的极点必须在实轴的两侧，积分才不等于零. 这对应于两种情况，即 $|\boldsymbol{p}|>k_F$、$|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|<k_F$ 和 $|\boldsymbol{p}|<k_F$、$|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|>k_F$，其积分结果分别记为 A 和 B，则有

$$A=\int\limits_{\substack{|\boldsymbol{p}|>k_F\\|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|<k_F}}\frac{d^3p d\omega_2}{(2\pi)^4}\frac{1}{\omega_2-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}^0+i\delta}\frac{1}{\omega_1+\omega_2-\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}^0-i\delta}$$

$$=-i\int\limits_{\substack{|\boldsymbol{p}|>k_F\\|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|<k_F}}\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\omega_1-\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}^0+\varepsilon_{\boldsymbol{p}}^0-i\delta} \tag{3.2.5}$$

$$B=i\int\limits_{\substack{|\boldsymbol{p}|<k_F\\|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|>k_F}}\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\omega_1+\varepsilon_{\boldsymbol{p}}^0-\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}^0+i\delta} \tag{3.2.6}$$

将结果 A 代入(3.2.4)式记为 $\Sigma_{2a}^A(\boldsymbol{k},\omega)$. 可以看出，$G^0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\omega-\omega_1)$ 的极点必须在下半平面对 ω_1 的积分才不等于零，由此算出

$$\Sigma_{2a}^A(\boldsymbol{k},\omega)=2\int\limits_{\substack{|\boldsymbol{p}|>k_F\\|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|<k_F\\|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}|<k_F}}\frac{d^3q d^3p}{(2\pi)^6}[V(q)]^2\frac{1}{\omega+\varepsilon_{\boldsymbol{p}}^0-\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}^0-\varepsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}^0-i\delta} \tag{3.2.7}$$

同理可求出 $\Sigma_{2a}^B(\boldsymbol{k},\omega)$ 为

$$\Sigma_{2a}^B(\boldsymbol{k},\omega)=2\int\limits_{\substack{|\boldsymbol{p}|<k_F\\|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|>k_F\\|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}|>k_F}}\frac{d^3q d^3p}{(2\pi)^6}[V(q)]^2\frac{1}{\omega+\varepsilon_{\boldsymbol{p}}^0-\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}^0-\varepsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}^0+i\delta} \tag{3.2.8}$$

因为有因子$[V(q)]^2$，积分的贡献主要来自小 q 值. q 很小时对 p 的积分限制在厚度为 q 的薄层中，即 $\int d^3p \sim q$，因此有

$$\Sigma^A \propto \int \frac{d^3q}{q^3} \propto \int \frac{dq}{q} \propto \ln q$$

带入积分下限 $q \to 0$，积分发散，Σ^B 也有相同的结果.

高级图形也有类似的发散项. 图 3.4 表示三级图中最发散的项. 它的特点是从一个费米环到另一个费米环的动量传递都是相同的. 有 n 个环的图带有因子$[V(q)]^{n+1} \propto q^{-2(n+1)}$，它在积分的下限 $q \to 0$ 引起发散. 这些图称为环图. 在自能的每一级中这些

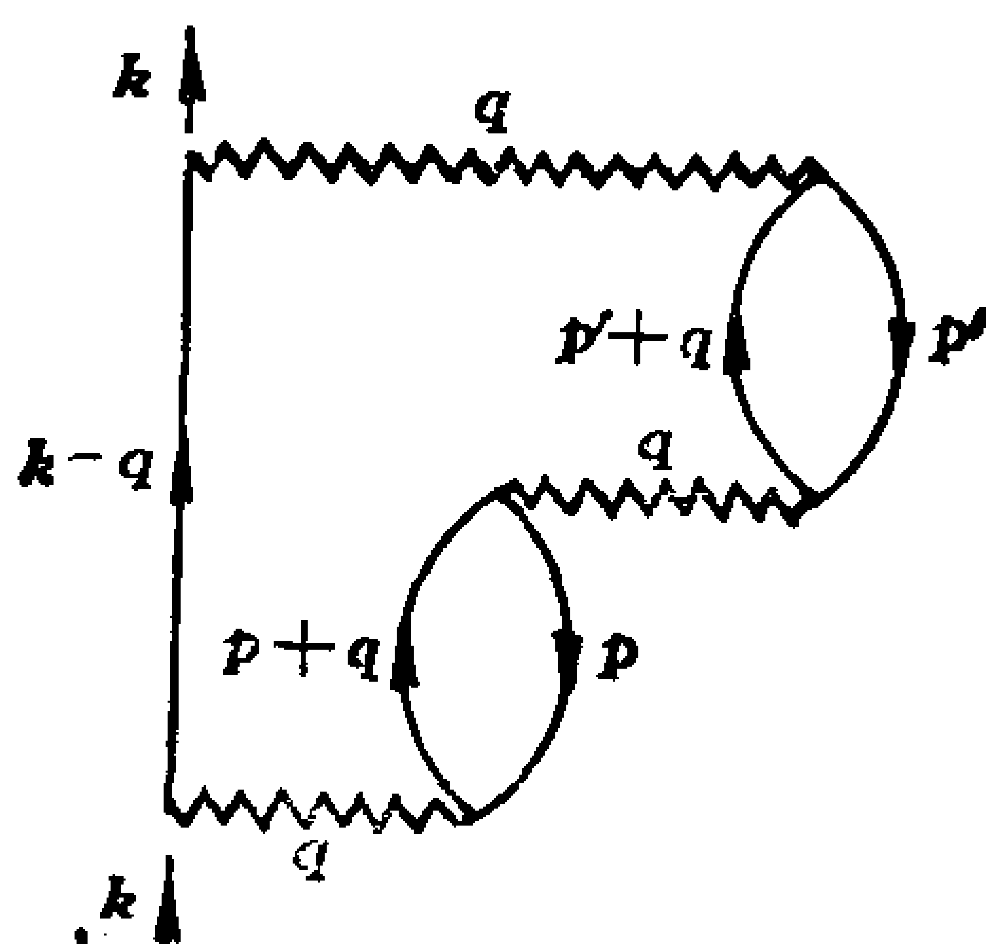


图 3.4

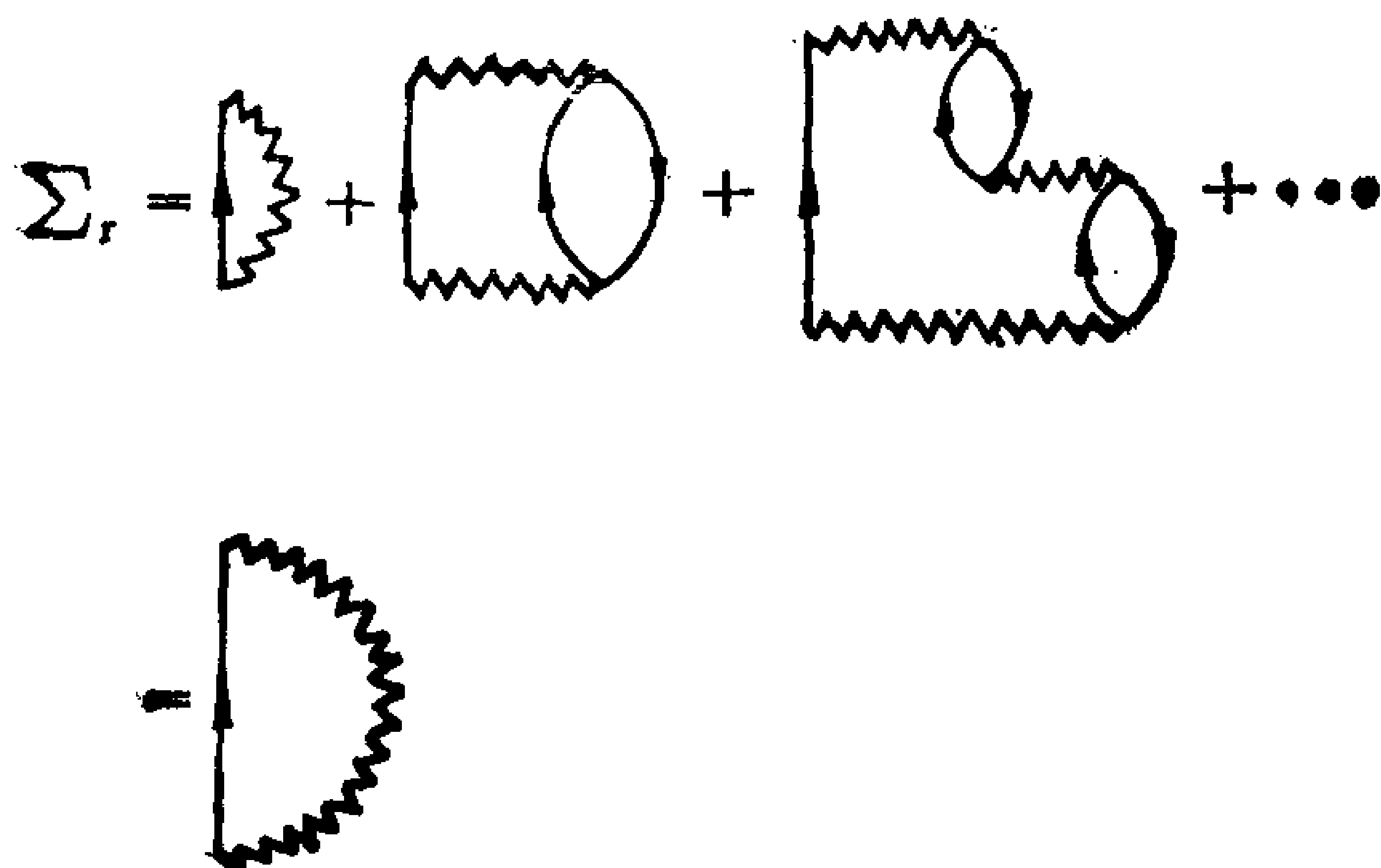


图 3.5

图都是最发散的. 但对这些图形求和仍可得到有限的结果. 如果在本征自能中只包括这些最发散的项,即自能只取图3.5所示的图这种近似称为环图近似,可以证明它就是 §3-1 中介绍的 RPA. 图中~~~~代表环图近似下的有效势,它是下面的图形的和. 若以 Π^0

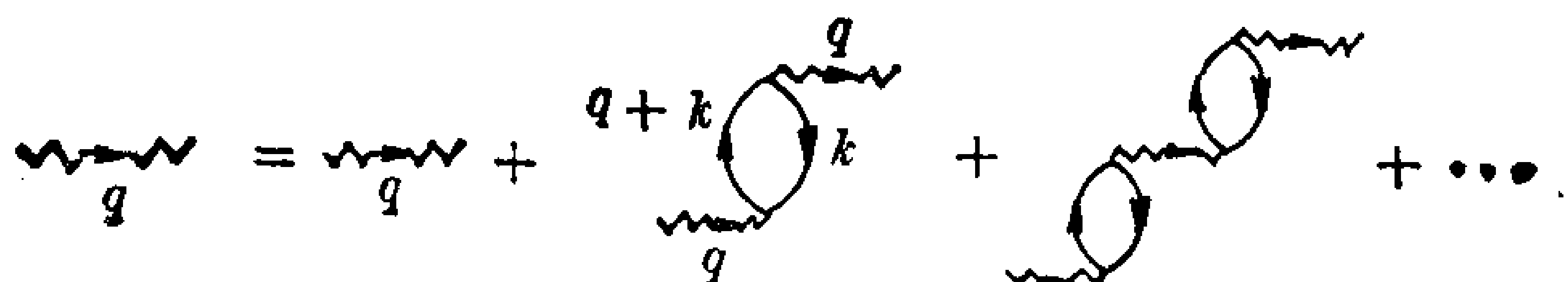


图 3.6

代表最低级正规极化图,则图 3.6 的解析表达式为

$$\begin{aligned} V_{\mathrm{r}}(q) &= V(q) + V(q)\Pi^0(q)V(q) + \cdots \\ &= V(q) + V(q)\Pi^0(q)V_{\mathrm{r}}(q) \end{aligned} \tag{3.2.9}$$

写出图 3-6 中第一项和第二项的表达式就可得到Π^0 的公式

$$\begin{aligned} V_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q}, q_0) = V(q) + [V(q)]^2(-2)\mathrm{i}\int \frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}k_0}{(2\pi)^4} G^0(\boldsymbol{k}, k_0) \\ G^0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}, q_0+k_0) + \cdots \end{aligned} \tag{3.2.10}$$

积分前的因子 2 是对自旋求和的结果. 由此得到

$$\Pi^0(\boldsymbol{q}, q_0) = -2\mathrm{i}\int \frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4} G^0(\boldsymbol{k}, k_0) G^0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}, k_0+q_0) \tag{3.2.11}$$

由(3.2.9)式可解出

$$V_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q}, q_0) = \frac{V(q)}{1 - V(q)\Pi^0(\boldsymbol{q}, q_0)} = \frac{V(q)}{\kappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q}, q_0)} \tag{3.2.12}$$

$$\kappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q}, q_0) = 1 - V(q)\Pi^0(\boldsymbol{q}, q_0) \tag{3.2.13}$$

V_{r} 是环图近似下的有效势,χ_{r} 是环图近似下的介电常数. 环图近似下的自能是

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mathrm{r}}(k) &= \mathrm{i}\int \frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4} V_{\mathrm{r}}(q) G^0(k-q) \\ &= \mathrm{i}\int \frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4} \frac{V(q)}{\chi_{\mathrm{r}}(q)} G^0(k-q) \end{aligned} \tag{3.2.14}$$

虽然每级环图都发散，但$\Sigma_r(k)$是有限的．这是由于我们用了屏蔽相互作用，它在$q\to0$时保持有限．

二、$\Pi^0(\boldsymbol{q},q_0)$的计算

要计算Σ_r需要计算$\Pi^0(\boldsymbol{q},q_0)$．$\Pi_0$和相互作用的性质无关，完全由自由电子气的性质决定．先完成(3.2.11)式中对频率的积分．代入G^0的公式后被积函数共有4项．其中两项的极点在实轴的同一侧，在实轴的另一边封闭积分回路，积分的结果是零．不等于零的两项是

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},q_0)=2\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\left[\frac{\theta(|\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}|-k_{\mathrm{F}})\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|)}{q_0+\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}+\mathrm{i}\eta}-\frac{\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}|)\theta(|\boldsymbol{k}|-k_{\mathrm{F}})}{q_0+\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\mathrm{i}\eta}\right] \tag{3.2.15}$$

在第二项中作变换$\boldsymbol{k}'\to-\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}$，得到

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},q_0)=2\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\theta(|\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}|-k_{\mathrm{F}})\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|)\times\left(\frac{1}{q_0+\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}}+\mathrm{i}\eta}-\frac{1}{q_0+\varepsilon^0_{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mathrm{i}\eta}\right) \tag{3.2.16}$$

可以看出，被积函数是q_0的偶函数，$|q_0|\to\infty$时有

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},q_0)\to O(q_0^{-2}),\quad |q_0|\to\infty$$

由于这种对称性我们只需研究$q_0>0$的情况．令

$$\varepsilon_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{k}}=\varepsilon^0_{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{2m}[(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})^2-\boldsymbol{k}^2]=\frac{1}{m}\left(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}+\frac{1}{2}q^2\right) \tag{3.2.17}$$

利用$\theta(x)=1-\theta(-x)$可以得到

$$\mathrm{Re}\Pi^0(\boldsymbol{q},q_0)=2P\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}[1-\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|)]\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|)$$

$$\times \frac{2\varepsilon_{qk}}{q_0^2-(\varepsilon_{qk})^2} \tag{3.2.18}$$

其中第二项中阶梯函数的乘积对变换 $\boldsymbol{k} \rightleftarrows \boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ 是偶的而 ε_{qk} 对此变换是奇的，因此这一项的积分等于零. $\mathrm{Re}\Pi^0$ 简化为

$$\mathrm{Re}\Pi^0(\boldsymbol{q},q_0)=2P\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|)\left[\frac{1}{q_0-\frac{1}{m}\left(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}+\frac{1}{2}q^2\right)}-\frac{1}{q_0+\frac{1}{m}\left(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}+\frac{1}{2}q^2\right)}\right] \tag{3.2.19}$$

引入无量纲频率变量

$$\nu=q_0\frac{m}{k_{\mathrm{F}}^2}$$

动量以 k_{F} 为单位，则(3.2.19)式变为

$$\mathrm{Re}\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu)=2mk_{\mathrm{F}}P\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\theta(1-k)\times\left(\frac{1}{\nu-qk\cos\theta-\frac{1}{2}q^2}-\frac{1}{\nu+qk\cos\theta+\frac{1}{2}q^2}\right) \tag{3.2.20}$$

完成积分后得到

$$\mathrm{Re}\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu)=\frac{2mk_{\mathrm{F}}}{4\pi^2}\left\{-1+\frac{1}{2q}\left[1-\left(\frac{\nu}{q}-\frac{q}{2}\right)^2\right]\ln\left|\frac{1+\left(\nu/q-\frac{1}{2}q\right)}{1-\left(\nu/q-\frac{1}{2}q\right)}\right|-\frac{1}{2q}\left[1-\left(\frac{\nu}{q}+\frac{q}{2}\right)^2\right]\ln\left|\frac{1+\left(\nu/q+\frac{1}{2}q\right)}{1-\left(\nu/q+\frac{1}{2}q\right)}\right|\right\} \tag{3.2.21}$$

Π^0 的虚数部分可求出为

$$\mathrm{Im}\Pi^0(\boldsymbol{q},q_0)=-\int\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2}\theta(|\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}|-k_{\mathrm{F}})\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|)$$

$$\times[\delta(q_0-\varepsilon_{q\boldsymbol{k}})+\delta(q_0+\varepsilon_{q\boldsymbol{k}})] \tag{3.2.22}$$

只需要考虑 $q_0>0$ 的情况. 阶梯函数保证 $\varepsilon_{q\boldsymbol{k}}$ 大于零. 用前面引入的无量纲变量及等式

$$\delta(ax)=\frac{1}{|a|}\delta(x) \tag{3.2.23}$$

可将(3.2.22)式中的 δ 函数写为

$$\delta(q_0-\varepsilon_{q\boldsymbol{k}})=\frac{m}{k_{\mathrm{F}}^2}\delta\left(\nu-\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}-\frac{q^2}{2}\right)$$

(3.2.22)式可写为

$$\mathrm{Im}\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu>0)=-mk_{\mathrm{F}}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^2}\theta(|\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}|-1)\theta(1-|\boldsymbol{k}|)$$

$$\delta\left(\nu-\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}-\frac{1}{2}q^2\right) \tag{3.2.24}$$

积分限制在费密球内部，而矢量 $|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|$ 必须在费密球的外面。能量守恒要求

$$\frac{1}{2}q+\hat{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{k}=\frac{\nu}{q} \tag{3.2.25}$$

它在 $\boldsymbol{k}$ 空间中定义一个平面. (3.2.24)式的积分代表这个平面与费密球相交的截面的面积. 有三种不同的情况.

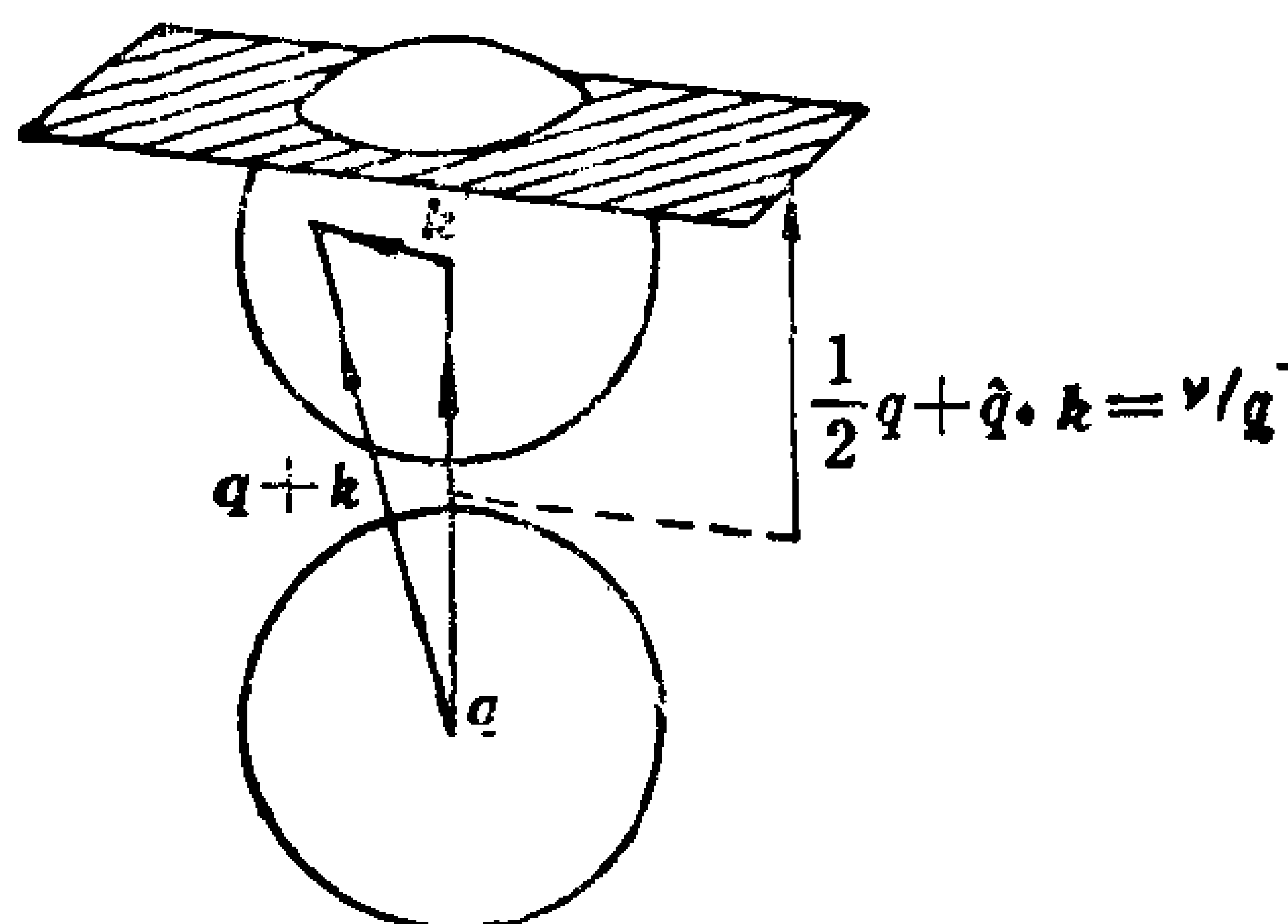


图 3.7

$$1,\quad q>2,\quad \frac{1}{2}q^2+q\geqslant\nu\geqslant\frac{1}{2}q^2-q \tag{3.2.26}$$

如果 $q>2$，则图 3.7 中的两个费密球并不相交. 我们只需求出平面与上面的费密球相交的面积. 如果能量输运 ν 很大或很小这个面积都等于零. 相交的条件正是(3.2.26)式. 令 $t=\cos\theta$，将积分变为

$$\mathrm{Im}\Pi^0(q,\nu)=-\frac{mk_{\mathrm{F}}}{4\pi}2\pi\int_{\nu/q-\frac{1}{2}q}^{1}k^2\mathrm{d}k\int_{-1}^{1}\mathrm{d}t\frac{1}{qk}\delta\left(\frac{\nu}{qk}-\frac{1}{2}\frac{q}{k}-t\right)$$

完成积分后得到

$$\mathrm{Im}\Pi^0(q,\nu)=-\frac{mk_{\mathrm{F}}}{4\pi q}\left[1-\left(\frac{\nu}{q}-\frac{1}{2}q\right)^2\right] \tag{3.2.27}$$

若 ν 在(3.2.26)式所限制的值的区间之外，则积分等于零.

$$2,\quad q<2,\quad q+\frac{1}{2}q^2\geqslant\nu\geqslant q-\frac{1}{2}q^2 \tag{3.2.28}$$

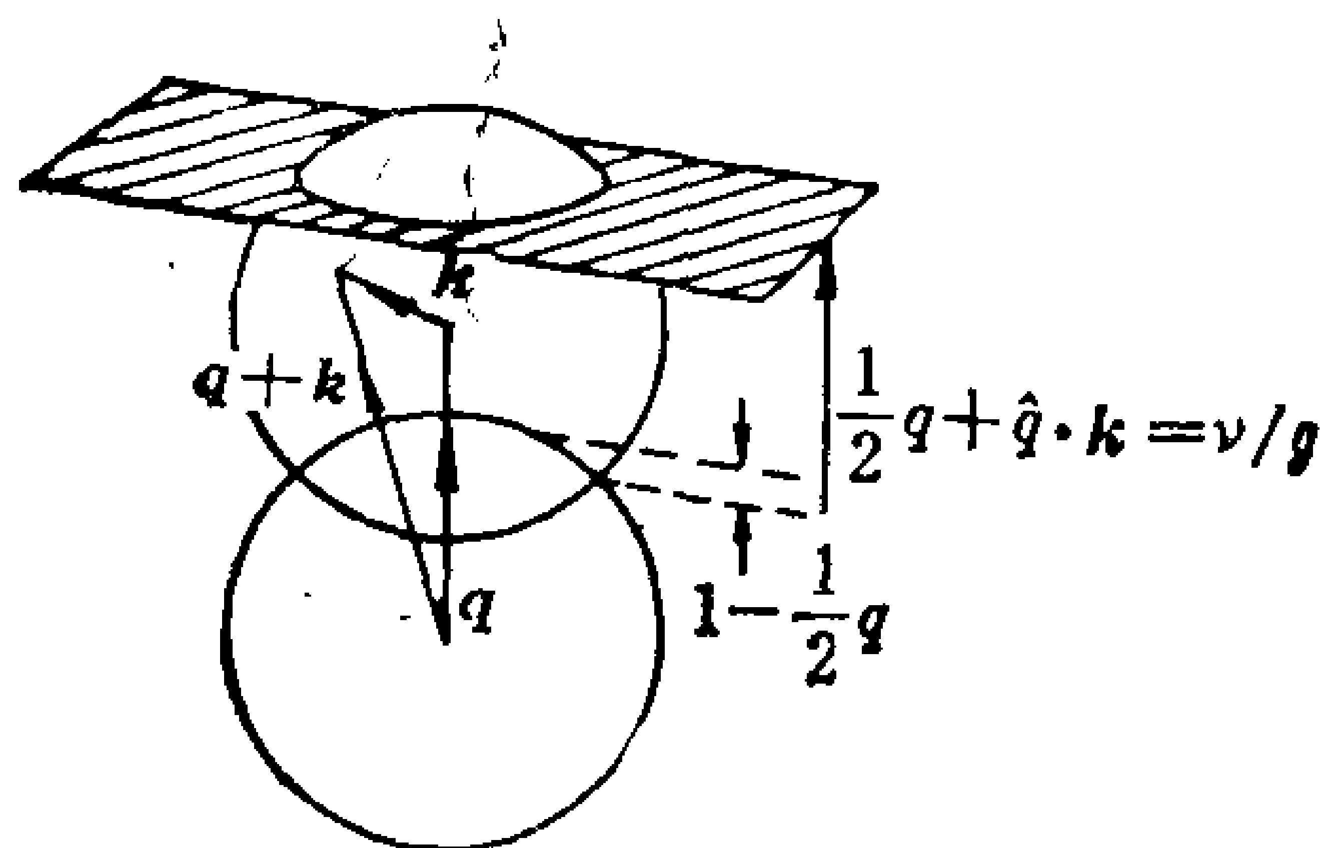


图 3.8

若 $q<2$ 则由 $k<1$ 和 $|k+q|>1$ 所定义的两个球相交，如图 3.8 所示. 若 ν 很大则平面不与上面的球相交，因而 $\mathrm{Im}\Pi^0=0$. ν 减小时平面与上面的相交. ν 很小时平面与下面的费密球相交，这是被“禁止”的. (3.2.28) 表明了相交的区域. 完成积分后得到

$$\mathrm{Im}\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu)=-\frac{mk_{\mathrm{F}}}{4\pi q}\left[1-\left(\frac{\nu}{q}-\frac{1}{2}q\right)^2\right] \qquad (3.2.29)$$

$$3,\quad q<2,\quad 0\leqslant\nu\leqslant q-\frac{1}{2}q^2 \qquad (3.2.30)$$

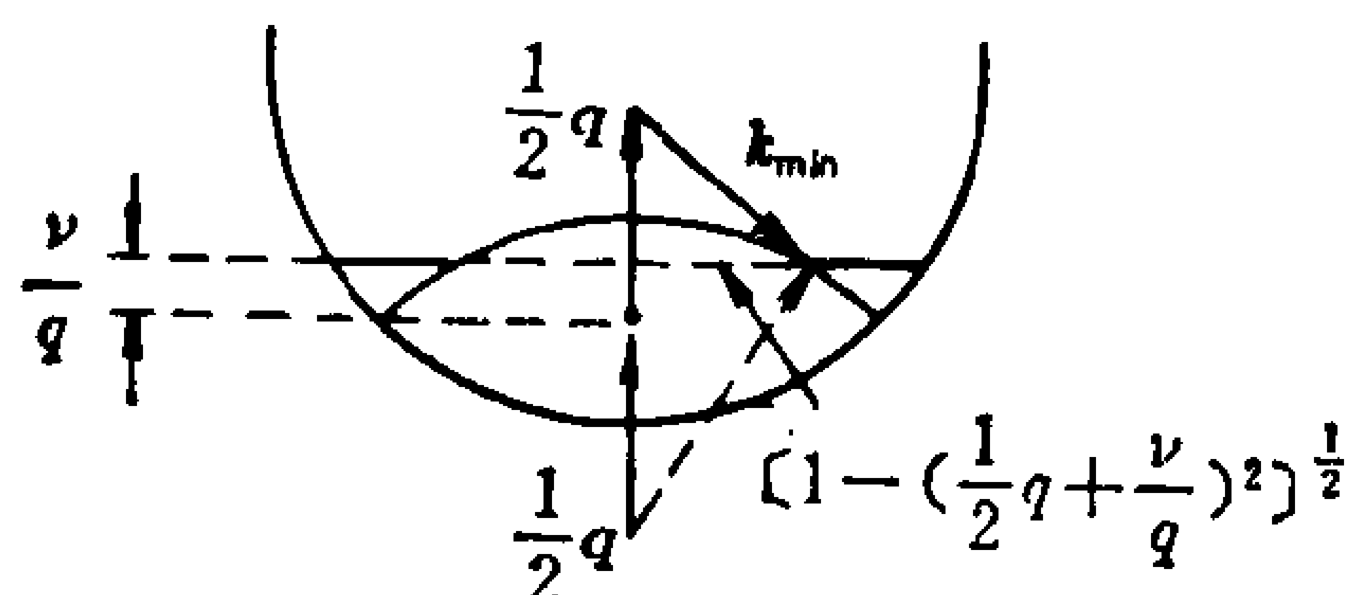


图 3.9

这时平面穿过下面的被“禁止”的球，允许的相交区域变成了一个圆环如图 3.9 所示．圆环的面积可由图 3.9 所示的几何关系求出．最小的 k 值是

$$k_{\min}^2=\left(\frac{1}{2}q-\nu/q\right)^2+\left[1-\left(\frac{1}{2}q+\nu/q\right)^2\right]=1-2\nu$$

最大的 k 值是费密动量．计算的结果是

$$\mathrm{Im}\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu)=-\frac{mk_{\mathrm{F}}}{4\pi^2}2\pi\int_{(1-2\nu)^{1/2}}^1\frac{k\mathrm{d}k}{q}\int_{-1}^1\mathrm{d}t\,\delta\left(\frac{\nu}{qk}-\frac{1}{2}\frac{q}{k}-t\right)$$

$$=-\frac{mk_{\mathrm{F}}}{4\pi q}[1-(1-2\nu)]=-\frac{mk_{\mathrm{F}}}{4\pi q}2\nu \qquad (3.2.31)$$

对 $\boldsymbol{q}$、ν 的所有数值，$\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu)$ 都可由(3.2.27)式、(3.2.29)式、(3.2.31)式标出．

下面列出 Π^0 的一些极限形式，这些公式在很多实际问题中要用到．

1，固定动量 q 使能量输运 $\nu\to0$．

$$\mathrm{Im}\Pi^0(\boldsymbol{q},0)=0$$

$$\mathrm{Re}\Pi^0(\boldsymbol{q},0)=\frac{mk_{\mathrm{F}}}{2\pi^2}\left[-1+\frac{1}{q}\left(1-\frac{1}{4}q^2\right)\ln\left|\frac{1-\frac{1}{2}q}{1+\frac{1}{2}q}\right|\right]$$

(3.2.32)

2，固定 ν 使 $q\to 0$

$$\left.\begin{aligned}&\mathrm{Im}\Pi^0(0,\nu)=0\\&\mathrm{Re}\Pi^0(q,\nu)\approx\frac{mk_{\mathrm{F}}}{2\pi^2}\frac{2}{3}\frac{q^2}{\nu^2},\ q\to 0\end{aligned}\right\}\tag{3.2.33}$$

3，固定 $\nu/q=x$，使 $q\to 0$，

$$\mathrm{Im}\Pi^0(q,qx)=\begin{cases}-mk_{\mathrm{F}}x/2\pi,\ q\to 0, & 0\leqslant x\leqslant 1\\ 0,\qquad q\to 0, & x>1\end{cases}\tag{3.2.34}$$

$$\mathrm{Re}\Pi^0(q,qx)=-\frac{mk_{\mathrm{F}}}{2\pi^2}\left(2-x\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right)\quad q\to 0$$

用 $\Pi^0(q,\nu)$ 可以求出环图近似下的介电常数 $\kappa_{\mathrm{r}}(q,\nu)=1-V(q)\Pi^0(q,\nu)$．经常用到的是上列几种极限情况．这时 $\kappa_{\mathrm{r}}(q,\nu)$ 取下面的值．

1，固定 q，使 $\nu\to 0$，

$$\kappa_{\mathrm{r}}(q,0)=1+\frac{2\alpha r_s}{\pi q^2}\left[1-\frac{1}{q}\left(1-\frac{1}{4}q^2\right)\ln\left|\frac{1-\frac{1}{2}q}{1+\frac{1}{2}q}\right|\right]\tag{3.2.35}$$

2，固定 ν，使 $q\to 0$，

$$\kappa_{\mathrm{r}}(0,\nu)=1-\frac{4\alpha r_s}{3\pi\nu^2}\tag{3.2.36}$$

3，固定 $\nu/q\equiv x>0$，使 $q\to 0$

$$\kappa_{\mathrm{r}}(q,qx)=1+\frac{4\alpha r_s}{\pi q^2}\left[1-\frac{x}{2}\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right]+\mathrm{i}\frac{2\alpha r_s x}{q^2}\theta(1-x)\tag{3.2.37}$$

其中 q、ν 是无量纲量．α 是常数

$$\alpha=\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3}\tag{3.2.38}$$

三、准粒子的能量和衰减

第一章曾指出，单粒子格林函数的极点决定准粒子的能量和

衰减. 用 Dyson 方程可将格林函数写为

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{\omega-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\Sigma_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)-\mathrm{i}\Sigma_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{k},\omega)} \qquad (3.2.39)$$

Σ_{R}和 Σ_{I} 分别代表Σ的实数和虚数部分. 下面讨论费密面附近的准粒子,取$k>k_{\mathrm{F}}$. 若用环图近似则 Σ_{r} 是(3.2.14)式. 现在求 Σ_{r} 的虚数部分Σ_{I}. 由于 $\kappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{k},\omega)$沿实轴有割线, 所以积分是很复杂的. 但 Quinn 和 Ferrell 指出,自能的虚数部分由自由电子格林函数极点的留数决定. (3.2.14)式对频率积分后得到

$$\mathrm{Im}\Sigma_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{k},\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0})=\int\frac{\mathrm{d}^{3}q}{(2\pi)^{3}}V(q)\,\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\kappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^{0})}\right] \qquad (3.2.40)$$

被积函数中有因子 $V(q)=4\pi e^{2}/q^{2}$, 所以小 q 值对积分的贡献是主要的. 由(3.2.37)式, $\nu/q\equiv x>0$, $q\to0$ 时有

$$\mathrm{Im}\kappa_{\mathrm{r}}(q,qx)=2\alpha r_{\mathrm{s}}\frac{x}{q^{2}}\theta(1-x)$$

用通常的单位表示则有

$$\mathrm{Im}\kappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},q_{0})=\frac{m^{2}}{2\pi}V(q)\,\frac{q_{0}}{q} \qquad (3.2.41)$$

对一定的 $\boldsymbol{q}$, q_0 很小时 $\mathrm{Im}\kappa_{\mathrm{r}}$ 比 $\mathrm{Re}\kappa_{\mathrm{r}}$ 小,因此可以取下面的近似:

$$\mathrm{Im}\left(\frac{1}{\kappa_{\mathrm{r}}}\right)=\frac{-\mathrm{Im}\kappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},q_{0})}{[\mathrm{Re}\kappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},0)]^{2}} \qquad (3.2.42)$$

在此近似下可将(3.2.40)式写为

$$\mathrm{Im}\Sigma_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{k},\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0})=-\frac{e^{4}m^{2}}{\pi^{2}}\int\mathrm{d}^{3}q\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}^{0}}{q^{5}[\mathrm{Re}\kappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},0)]^{2}} \qquad (3.2.43)$$

我们考虑实散射过程,即两个态都在费密面以上,因此有

$$k>|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}|>k_{\mathrm{F}} \qquad (3.2.44)$$

这个不等式决定角度积分的区间. 定义 x 为 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}=kqx$, 则 x 取值的区间是

$$0\leqslant x\leqslant x_{m}=(k^{2}-k_{\mathrm{F}}^{2})/2kq\leqslant1 \qquad (3.2.45)$$

上式中略去了 q^2 项. 实际上$(k-k_{\mathrm{F}})$是很小的. 对角度积分后

得到

$$\mathrm{Im}\Sigma_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{k},\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0})=-\frac{e^{4}m}{\pi}k_{\mathrm{F}}(k-k_{\mathrm{F}})^{2}\int\mathrm{d}q\frac{1}{q^{4}[\mathrm{Re}\kappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},0)]^{2}} \tag{3.2.46}$$

由此式可以看出 $\mathrm{Re}\kappa_{\mathrm{r}}$ 的作用，若没有这个因子则积分在下限发散，阻尼趋于无穷，单电子图象就不是正确的了.

对准空穴可得到相似的结果，但前面的符号相反. 这是由于如果一个空穴通过实散射过程失去能量则它就从费密面的下面接近费密面. 而电子是从费密面的上面接近费密面. 综合起来可将 Σ_{I} 写为

$$\lim_{\omega\to\mu}\Sigma_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{k},\omega)=-\mathrm{sgn}(\omega-\mu)c_{k}(\omega-\mu)^{2},\quad c_{k}\geqslant 0 \tag{3.2.47}$$

Σ_{I} 的正负号与格林函数分母中无穷小 δ 前面的正负号是一致的. 将(3.2.47)式代入(3.2.39)式得到

$$G(\boldsymbol{k},\omega)_{\omega\to\mu}=\frac{1}{\omega-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\Sigma_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)+\mathrm{i}\ \mathrm{sgn}(\omega-\mu)c_{k}(\omega-\mu)^{2}} \tag{3.2.48}$$

为了求出准粒子的能量和衰减，需解下面的极点方程

$$\omega-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\Sigma_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)+\mathrm{i}\ \mathrm{sgn}(\omega-\mu)c_{k}(\omega-\mu)^{2}=0 \tag{3.2.49}$$

$\Sigma_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$是 ω 的未知函数，先对它作近似. 先取零级近似，当 ω 很接近 μ 时，可略去虚数部分，得到

$$\omega_{0}\equiv E_{k}=\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}+\Sigma_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},E_{k}) \tag{3.2.50}$$

为了得到一级近似，将 Σ_{R} 在零级解附近展开

$$\Sigma_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\Sigma_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},E_{k})+(\omega-E_{k})\Sigma_{\mathrm{R}}'(\boldsymbol{k},E_{k})+\cdots$$

代入极点方程得到:

$$\begin{aligned}&\omega-[\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}+\Sigma_{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},E_{k})]-E_{\mathrm{R}}'(\boldsymbol{k},E_{k})(\omega-E_{k})\\&\quad+\mathrm{i}\ \lambda\mathrm{sgn}(\omega-\mu)c_{k}(\omega-\mu)^{2}=0\end{aligned} \tag{3.2.51}$$

λ 表示第几级近似，$\lambda=0$ 是零级近似. 对一级近似，令

$$\omega = E_k + \lambda\omega_1 \tag{3.2.52}$$

ω_1 是 ω 的一级修正. 将(3.2.52)式代入(3.2.51)式,得到

$$\lambda\omega_1 - \Sigma'_R\lambda\omega_1 + \mathrm{i}\lambda\,\mathrm{sgn}(E_k + \lambda\omega_1 - \mu)c_k(E_k - \mu + \lambda\omega_1)^2 = 0$$

只保留 λ 的一次项，得到

$$\omega_1 = -\mathrm{i}\,\mathrm{sgn}(E_k - \mu)\frac{c_k(E_k - \mu)^2}{1 - \Sigma'_R}$$

代入(3.2.52)式,取 $\lambda = 1$,得到

$$\omega = E_k + \omega_1 = E_k - \mathrm{i}\,\mathrm{sgn}(E_k - \mu)\frac{c_k(E_k - \mu)^2}{1 - \Sigma'_R} \tag{3.2.53}$$

由此得到准粒子的能量和衰减为

$$E_k = \varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} + \Sigma_R(\boldsymbol{k}, E_k) \tag{3.2.54}$$

$$\tau_k^{-1} = \mathrm{sgn}(E_k - \mu)\frac{c_k(E_k - \mu)^2}{(1 - \Sigma'_R)} \tag{3.2.55}$$

$1/\tau_k \propto (E_k - \mu)^2$. 它表明,在费密面附近,准粒子衰减比较小. 准确地处于费密面上的准粒子不能产生实的激发，因而寿命是无穷的.

在极点附近可将格林函数写为

$$\begin{aligned} G(\boldsymbol{k}, \omega) = {} & [\omega - [\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} + \Sigma_R(\boldsymbol{k}, E_k)] - \Sigma'_R(\boldsymbol{k}, E_k)(\omega - E_k) \\ & + \mathrm{i}\ \mathrm{sgn}(E_k - \mu)c_k(E_k - \mu)^2]^{-1} \\ & + F(\boldsymbol{k}, \omega) \end{aligned} \tag{3.2.56}$$

$F(\boldsymbol{k}, \omega)$ 代表高于一级近似的高级修正. (3.2.56)式又可写为

$$G(\boldsymbol{k}, \omega) = \frac{Z_k}{\omega - E_k + \mathrm{i}\tau_k^{-1}} + F(\boldsymbol{k}, \omega) \tag{3.2.57}$$

Z_k 是重整化因子

$$Z_k = [1 - \Sigma'_R(\boldsymbol{k}, E_k)]^{-1} \tag{3.2.58}$$

四、费密面

现在讨论电子间的库仑作用对费密面的影响. 自由电子系统

的分布函数 n_k^0 如图 3·10 所示. n_k^0 代表 $\boldsymbol{k}$ 态被电子占据的几率. 可以看出，$|\boldsymbol{k}|=k_F$ 时分布函数是不连续的. 正是由于这种不连续我们才可以说，$\boldsymbol{k}$ 空间存在费密面. 在相互作用电子气中，一对电子的平均相互作用能与费米能很接近. 这样强的相互作用将引起电子之间的碰撞，将 k_F 以下的态的电子激发到 k_F 以上的未

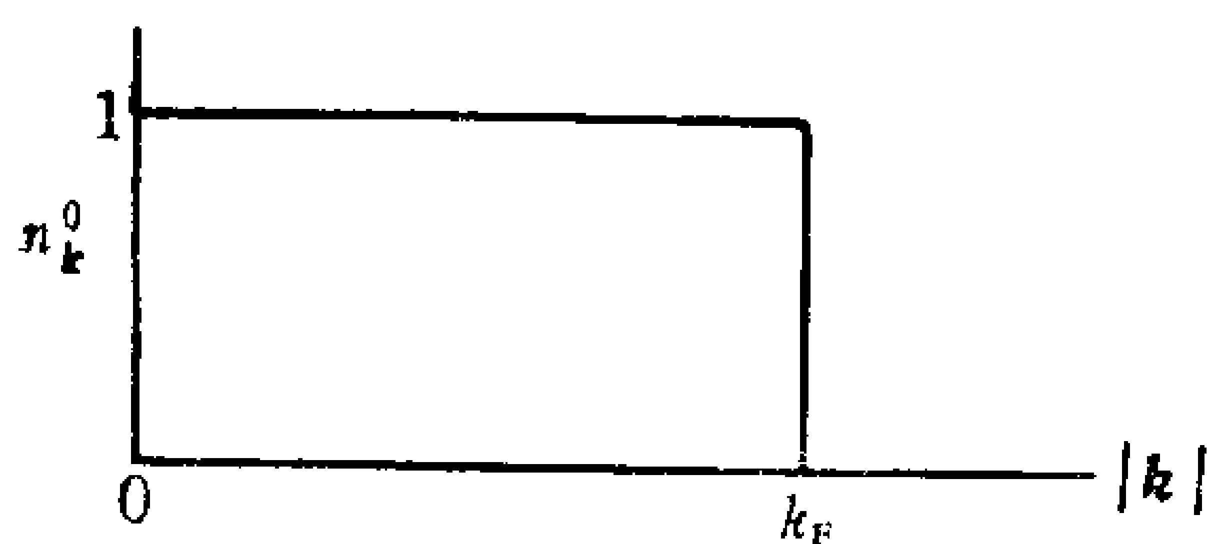


图 3.10

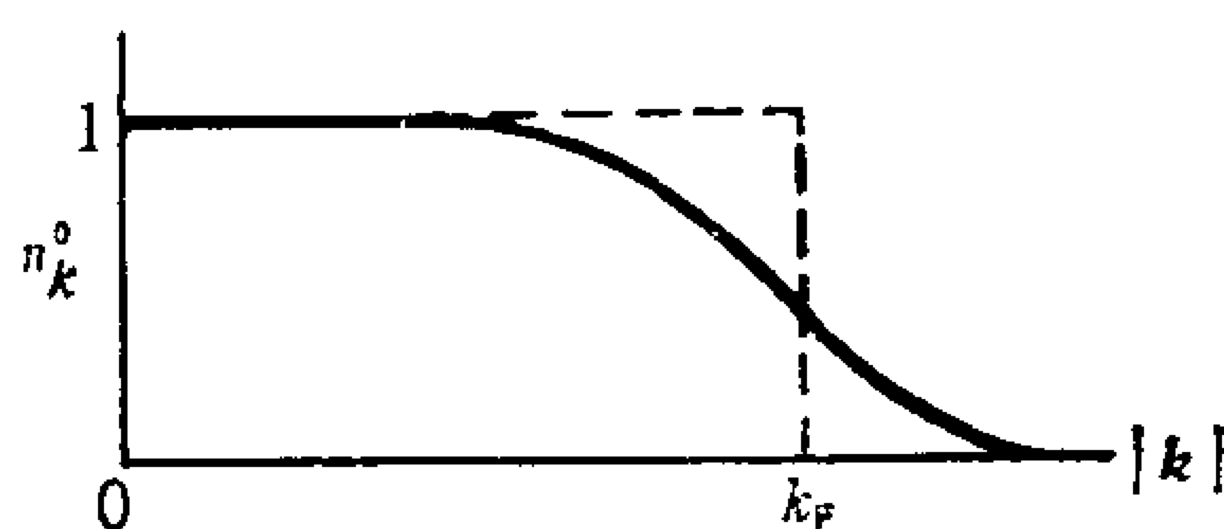


图 3.11

占据态，使图 3.10 的不连续性变得模糊，n_k^0 可能变成图 3.11那样的分布. 但实验证明，在 $|\boldsymbol{k}|=k_F$ 仍存在不连续性.

格林函数理论已解决了这个问题. 在 $|\boldsymbol{k}|=k_F$ 处仍存在不连续性，但不连续性小于 1. n_k 可用格林函数表示为

$$n_k=\langle\Psi_0|c_{Hk}^+c_{Hk}|\Psi_0\rangle=-\mathrm{i}\lim_{t\to 0^-}G(\boldsymbol{k},t) \qquad (3.2.59)$$

由(3.2.57)式可求出 $G(\boldsymbol{k},t)$ 为

$$G(\boldsymbol{k},t)=-\mathrm{i}Z_k\{\theta(t)\theta(E_k-\mu)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_kt-t/\tau_k}$$
$$-\theta(-t)\theta(\mu-E_k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_kt+t/\tau_k}\}+F(\boldsymbol{k},t) \quad (3.2.60)$$

$F(\boldsymbol{k},t)$ 是 $F(\boldsymbol{k},\omega)$ 的傅氏变换. 代入(3.2.59)式可以得到

$$n_k=Z_k\theta(\mu-E_k)-\mathrm{i}F(\boldsymbol{k},0^-) \qquad (3.2.61)$$

假定 $F(\boldsymbol{k},0^-)$ 在 $k=k_\mu$ 附近是连续的，则(3.2.61)式表明，$E_k=\mu$ 时 n_k 有不连续变化. 不连续的大小是 Z_{k_μ}. k_μ 是相应于化学势的动量. 图 3-12 中实线表示相互作用电子气的分布函数. 虚线表示自由电子气的分布函数. 根据 Daniel 等人的计算，对金属钠 $Z_{k_\mu}\approx 0.5$，与 1 有很大差别. 这些结果已为实验所证实.

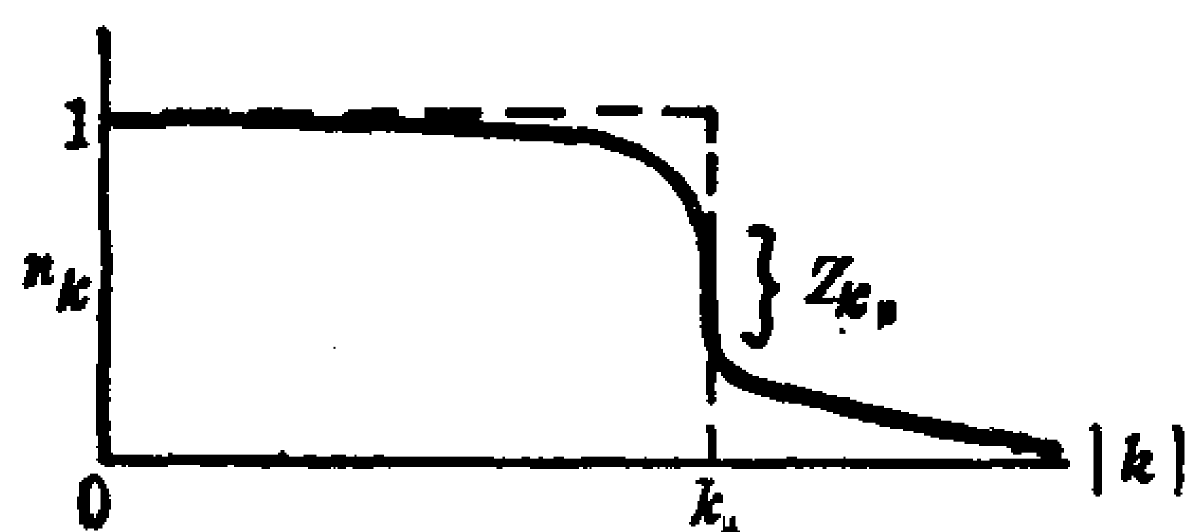


图 3.12

§3.3 稠密电子气的介电响应函数

本节讨论电子气对依赖于空间和时间的纵场的介电响应. 这种响应可以用推迟介电常数 $\kappa^R(q, \omega)$ 描写, 因为是对纵场的响应, $\kappa^R(q,\omega)$ 又称为纵介电常数. Nozieres 和 Pines 认为, 用 $\varepsilon(k, \omega)$ 可以统一地描写相互作用电子气的性质. 事实上由 $\kappa^R(q, \omega)$ 可以得到: a, 系统对弱的纵场的响应, b, 密度涨落激发谱, c, 密度涨落的时间相关, d, 基态能量. 本节介绍电子气介电响应函数的一般理论. §3-4 节用它讨论电子气对杂质原子的屏蔽, §3-5 节根据它讨论电子气中的元激发.

一、介电响应函数

为了计算电子气的介电函数 $\kappa^R(q,\omega)$, 可研究电子气对试探电荷势场的响应. 总哈密顿量是

$$\hat{H}_t = \hat{H} + \hat{H}^{ex} \tag{3.3.1}$$

其中 $\hat{H}^{ex}$ 是试探电荷势场对系统产生的微扰哈密顿量. $\hat{H}$ 是相互作用电子气的哈密顿量(3.1.20)式. 假定外界扰动是标量势 $\varphi^{ex}(\boldsymbol{x}t)$, 则有

$$\hat{H}^{ex}_H(t) = \int d^3x \hat{n}_H(\boldsymbol{x}t) e\varphi^{ex}(\boldsymbol{x}t) \tag{3.3.2}$$

$\hat{n}_H$ 是未扰动系统的粒子密度算符, e 是电子电荷. 假定标量势 $\varphi^{ex}(\boldsymbol{x}t)$ 是在 $t=t_0$ 时引入的. 线性响应由密度变化 $\delta\langle \hat{n}(\boldsymbol{x}t)\rangle$

表示，感应电荷密度是 $\rho_s(\boldsymbol{x}t)=-e\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{x}t)\rangle$。根据§1-7中的线性响应理论，$\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{x}t)\rangle$可写为

$$\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{x}t)\rangle=\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int\mathrm{d}^3x'e\varphi^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x}'t')\langle\Psi_0|[\hat{n}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}'t'),\hat{n}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}t)]|\Psi_0\rangle=\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int\mathrm{d}^3x'e\varphi^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x}'t')\langle\Psi_0|[\tilde{n}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}'t'),\ \tilde{n}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}t)]|\Psi_0\rangle \tag{3.3.3}$$

式中引入了

$$\tilde{n}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}t)=\hat{n}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}t)-\langle\hat{n}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}t)\rangle$$

$\tilde{n}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}t)$是对平均密度的偏离．定义推迟密度相关函数为

$$\mathrm{i}D^{\mathrm{R}}(x,x')=\theta(t-t')\langle\Psi_0|[\tilde{n}_{\mathrm{H}}(x),\tilde{n}_{\mathrm{H}}(x')]|\Psi_0\rangle \tag{3.3.4}$$

则(3.3.3)式可写为

$$\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{x}t)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\int\mathrm{d}^3x'D^{\mathrm{R}}(x,x')e\varphi^{\mathrm{ex}}(x') \tag{3.3.5}$$

D^{R}的推迟性质保证了因果性条件，即只有$t'<t$时的势对$\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{x}t)\rangle$有影响．(3.3.5)式中已将积分下限$t_0$推到$-\infty$，并利用$\theta(t-t')$的性质将积分上限推到$+\infty$．(3.3.5)式表明，算符对外界扰动的线性响应可用适当的推迟函数的积分表示．如果系统是空间均匀的，则有

$$D^{\mathrm{R}}(x,x')=D^{\mathrm{R}}(x-x')$$

引入傅氏变换

$$\varphi^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{k},\omega)=\int\mathrm{d}^3x\int\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}\varphi^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x}t) \tag{3.3.6}$$

$$\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{k},\omega)\rangle=\int\mathrm{d}^3x\int\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{x}t)\rangle \tag{3.3.7}$$

$$D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\int\mathrm{d}^3x\int\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{x},t) \tag{3.3.8}$$

代入(3.3.5)式得到

$$\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{k},\omega)\rangle=D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)e\varphi^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{k},\omega) \tag{3.3.9}$$

(3.3.9)式表明，如果 D^{R} 有极点，即 $D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$ 在 ω 的某些点变为无穷，那么在这些点既使 $\varphi^{\mathrm{ex}}=0$，$\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{k}\omega)\rangle$ 仍可取不等于零的数值，这表示系统的一种自由振荡. 所以系统的激发谱由 $D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$ 的极点决定.

若取微扰哈密顿量为

$$H_{\mathrm{H}}^{\mathrm{ex}}(t)=\int\mathrm{d}^3x\int\mathrm{d}^3x'\hat{n}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')n^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x}',t) \quad (3.3.10)$$

式中 $n^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x},t)$ 是外加粒子的密度. $V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$ 是系统粒子与外加粒子的相互作用势. (3.3.10) 式等价于取(3.3.2) 式中的 $e\varphi^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x},t)$ 为

$$e\varphi^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x},t)=\int\mathrm{d}^3x'V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')n^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x}',t)$$

则密度变化可写为

$$\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{q},\omega)\rangle=V(q)D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)n^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q},\omega) \quad (3.3.11)$$

与(3.3.9)式比较得到

$$e\varphi^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{k},\omega)=V(\boldsymbol{k})n^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{k},\omega) \quad (3.3.12)$$

定义推迟介电函数 κ^{R} 为

$$\langle\hat{n}_{\mathrm{tot}}(\boldsymbol{q},\omega)\rangle=n^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q},\omega)+\langle\hat{n}_{\mathrm{ind}}(\boldsymbol{q},\omega)\rangle=\frac{n^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q},\omega)}{\kappa^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)} \quad (3.3.13)$$

$\hat{n}_{\mathrm{tot}}$ 是总粒子密度，$\langle\hat{n}_{\mathrm{ind}}\rangle$ 是感应粒子密度即 $\delta\langle\hat{n}\rangle$. κ^{R} 就是推迟介电函数. (3.3.13)式又可写为

$$\frac{1}{\kappa^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)}=1+\frac{\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{q},\omega)\rangle}{n^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q},\omega)}=1+V(q)D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega) \quad (3.3.14)$$

或写为

$$\frac{1}{\kappa^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)}-1=V(q)D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega) \quad (3.3.15)$$

$\kappa^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)$ 的零点正是 $D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)$ 的极点. 所以电子系统的激发谱也由方程 $\kappa^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)=0$ 决定. 以上计算中作的唯一近似是 n^{ex} 引起

的微扰很弱，因而只保留到 n^{ex} 的线性项. 而电子之间的库仑作用则是完全包括的. 所以要准确求出介电函数 κ^{R}，需要准确求解多电子问题.

二、密度相关函数

上面的分析表明，线性响应由推迟相关函数决定. 但这样的函数如 $D^{R}(\boldsymbol{q},\omega)$ 不能用费曼-戴逊微扰级数计算，因为 Wick 定理只能应用于编时乘积. 现在引入密度相关函数 $D(x,x')$，其定义为

$$\mathrm{i}D(x,x')=\langle\Psi_0|T[\tilde{n}_{\mathrm{H}}(x)\tilde{n}_{\mathrm{H}}(x')]|\Psi_0\rangle \qquad (3.3.16)$$

D 又称为极化传播函数，对变量 (x,x') 是对称的，即有

$$D(x,x')=D(x',x)$$

(3.3.16)式可以在相互作用绘景中写出

$$\mathrm{i}D(x,x')=\langle\Phi_0|T[\tilde{n}_{\mathrm{I}}(x)\tilde{n}_{\mathrm{I}}(x')S(\infty,\infty)]|\Phi_0\rangle_c \qquad (3.3.17)$$

角标 c 表示只取相连图. 零级近似为

$$\mathrm{i}D^0(x,x')=\langle\Phi_0|\mathrm{T}[\hat{\psi}_\alpha^+(x)\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x')\hat{\psi}_\beta^+(x')]|\Phi_0\rangle$$
$$-\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\alpha^+(x)\hat{\psi}_\alpha(x)|\Phi_0\rangle\langle\Phi_0|\hat{\psi}_\beta^+(x')\hat{\psi}_\beta(x')|\Phi_0\rangle \qquad (3.3.18)$$

利用 Wick 定理将其写为

$$\begin{aligned}\mathrm{i}D^0(x,x')&=\mathrm{i}G^0_{\alpha\alpha}(x,x^+)\mathrm{i}G^0_{\beta\beta}(x',x'^+)\\&\quad-\mathrm{i}G^0_{\alpha\beta}(x,x')\mathrm{i}G^0_{\beta\alpha}(x',x)\\&\quad-\langle\hat{n}(x)\rangle\langle\hat{n}(x')\rangle\\&=(2s+1)G^0(x,x')G^0(x',x)\end{aligned}$$

可用图3.13表示为

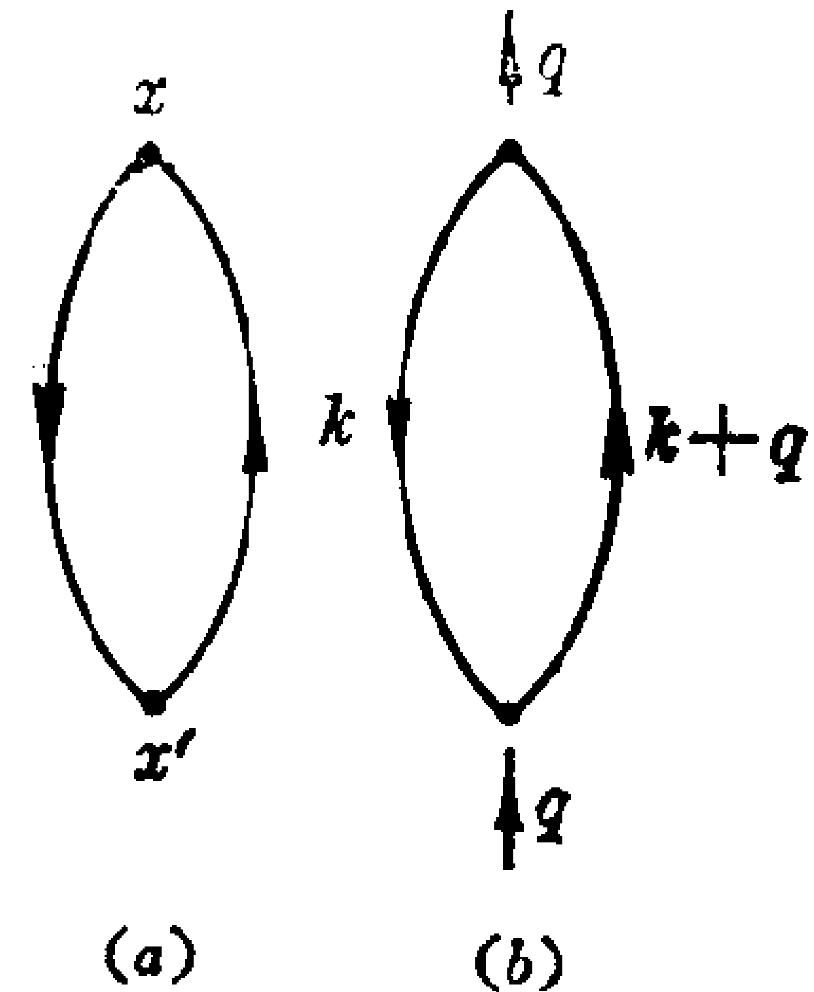


图 3.13

与(3.2.11)式比较得到

$$D^0(x,x')=\Pi^0(x,x') \qquad (3.3.19)$$

Π^0 正是零级极化部分. D 的完全微扰展开包括下图所示

$D(x,x')=$ [diagram] $+$ [diagram] $+$ [diagram] $+\cdots$

图 3.14

的项．这正是我们在§1-6中引入的极化部分，因此有

$$D(x,x')=\Pi(x,x') \tag{3.3.20}$$

Π 可以用正规极化部分 Π^* 表示为

$$\Pi=\Pi^*+\Pi^*V\Pi^*+\Pi^*V\Pi^*V\Pi^*+\cdots=\Pi^*+\Pi^*V\Pi \tag{3.3.21}$$

由此得到

$$\Pi(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{\Pi^*(\boldsymbol{q},\omega)}{1-V(q)\Pi^*(\boldsymbol{q},\omega)} \tag{3.3.22}$$

如果近似地取 $\Pi^*=\Pi^0$ 则得到环图近似的结果

$$\Pi_r(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{\Pi^0(\boldsymbol{q},\omega)}{1-V(q)\Pi^0(\boldsymbol{q},\omega)} \tag{3.3.23}$$

Π_r 的费曼图如下图所示

$\Pi_r=$ [diagram] $+$ [diagram] $+$ [diagram] $+\cdots$

图 3.15

用谱表示方法可以证明 $D(\boldsymbol{q},\omega)$ 和 $D^R(\boldsymbol{q},\omega)$ 有以下关系

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}D(\boldsymbol{q},\omega)&=\mathrm{Re}D^R(\boldsymbol{q},\omega)\\ \mathrm{sgn}\omega\mathrm{Im}D(\boldsymbol{q},\omega)&=\mathrm{Im}D^R(\boldsymbol{q},\omega)\end{aligned} \tag{3.3.24}$$

这样，只要我们用微扰论求出 $D(\boldsymbol{q},\omega)$，就可用（3.3.24）式求出 $D^R(\boldsymbol{q},\omega)$．这对任何级近似都是成立的．由（3.3.23）式可求出

$$\mathrm{Re}\Pi_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{\mathrm{Re}\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\omega)-|\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\omega)|^{2}V(q)}{[1-V(q)\mathrm{Re}\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\omega)]^{2}+[V(q)\mathrm{Im}\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\omega)]^{2}}$$

$$\mathrm{Im}\Pi_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{\mathrm{Im}\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\omega)}{[1-V(q)\mathrm{Re}\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\omega)]^{2}+[V(q)\mathrm{Im}\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\omega)]^{2}}$$

对 $\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\omega)$ (3.3.24)式也是成立的. 利用这些公式可以证明

$$\Pi_{\mathrm{r}}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{\Pi^{0\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)}{1-V(q)\Pi^{0\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)} \qquad (3.3.25)$$

用此公式可以计算环图近似下电子系统对外界密度扰动的响应.

§3.4 电子气对杂质原子的屏蔽

杂质原子对固体性质的影响是一个很重要的课题. 下面讨论电子气中有一个杂质原子时电子密度的变化. 有很多杂质的情况将在第六章讨论. 如果不考虑电子之间的库仑作用，则杂质的影响可表示为一个单电子在杂质势场中的散射. 非相互作用多电子系统的统计力学归结为根据费密统计填充新的能级，原则上并不需要多体理论的方法. 如果考虑电子之间的相互作用，则我们遇到的是一个多体问题. 杂质问题中的一个重要概念是屏蔽. 如果在电子系统中加入一个试验电荷或其它扰动，电子将运动并在试验电荷周围产生新的分布. 这个新的电荷分布在远处将抵消试验电荷的电场. 如果在远处电场未被抵消则试验电荷将吸引（或排斥）电荷，使在远处的电场完全被抵消. 若电场是由杂质电荷分布 $\rho_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{x})$ 引起的，杂质的总电荷 $Q_{\mathrm{i}}=\int \mathrm{d}^{3}x\rho_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{x})$，则吸引到其周围的总电荷量应为 $-Q_{\mathrm{i}}$. 屏蔽电荷 $\rho_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{x})$ 也有自己的分布. 由杂质电荷 $\rho_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{x})$ 和屏蔽电荷产生的总屏蔽电势 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 是

$$\varphi(\boldsymbol{x})=\int \mathrm{d}^{3}x'\,\frac{\rho_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{x}')+\rho_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{x}')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$$

只要求出 $\rho_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{x})$ 由此式就可求出 $\varphi(\boldsymbol{x})$.

屏蔽电荷不一定处于杂质电场产生的束缚态中. 一般情况下

屏蔽电荷就是金属或半导体中的未束缚导电电子．若杂质的势是吸引的，则电子在晶格中运动时在杂质附近停留较长的时间，平均起来杂质附近电子密度就较大，这就是屏蔽电荷．若杂质的势对电子是排斥的，则电子在杂质附近停留较短的时间，平均起来电子密度就较小，这时屏蔽电荷是正的，表示电子密度的减小．

作为一个例子，考虑简并电子气对静态杂质的响应．假定杂质带正电荷 Ze，则其势场是

$$\varphi^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x}t)=Ze|\boldsymbol{x}|^{-1} \tag{3.4.1}$$

$$\varphi^{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q},\omega)=8\pi^2 Ze\, q^{-2}\delta(\omega) \tag{3.4.2}$$

这个点电荷改变了它附近的电子分布．感应电子密度是(注意，杂质对电子的势为 $-e\varphi^{\mathrm{ex}}$)，

$$\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{x})\rangle=-\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\ 0)\frac{4\Pi Ze^2}{q^2} \tag{3.4.3}$$

§3-3 节已经证明，编时密度相关函数 D 等于极化部分 Π．若定义 Π^{R} 为推迟极化部分，则有 $D^{\mathrm{R}}=\Pi^{\mathrm{R}}$．因此可将(3.4.3)式写为

$$\begin{aligned}\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{x})\rangle&=-\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\Pi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},0)\frac{4\Pi Ze^2}{q^2}\\&=-\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\Pi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},0)ZV(q)\\&=-Z\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\{[\varkappa^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},0)]^{-1}-1\}\end{aligned} \tag{3.4.4}$$

其中 $V(q)=4\pi e^2/q^2$ 是裸势．可以证明

$$\varkappa^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)=\mathrm{Re}\varkappa(\boldsymbol{q},\omega)+\mathrm{i}\,\mathrm{sgn}\omega\mathrm{Im}\varkappa(\boldsymbol{q},\omega) \tag{3.4.5}$$

$\varkappa(\boldsymbol{q},\ \omega)$是(1.6.23)式引入的广义介电常数．(3.4.4)和(3.4.5)式可以准确地描述点电荷附近的屏蔽．

若用环图近似，则 $\varkappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},0)$是实数，推迟介电常数变为：

$$\varkappa_{\mathrm{r}}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},0)=\varkappa_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},\ 0)=1+4\alpha r_s\frac{k_{\mathrm{F}}^2}{\pi q^2}g\left(\frac{q}{k_{\mathrm{F}}}\right) \tag{3.4.6}$$

函数 $g(x)$ 的表达式是

$$g(x)=\frac{1}{2}-\frac{1}{2x}\left(1-\frac{1}{4}x^2\right)\ln\left|\frac{1-\frac{1}{2}x}{1+\frac{1}{2}x}\right| \tag{3.4.7}$$

$g(x)$ 有以下的性质

$$g(x)\approx 1+O(x^2),\qquad x\ll 1 \tag{3.4.8}$$

$$g(x)\approx\frac{1}{2}+\frac{1}{4}(x-2)\ln\left[\frac{1}{4}|x-2|\right],\quad |x-2|\ll 1 \tag{3.4.9}$$

$$g(x)\approx\frac{4}{3}x^{-1},\qquad x\gg 1 \tag{3.4.10}$$

将(3.4.6)式代入(3.4.4)式得到感应电荷密度

$$\begin{aligned}\delta\langle\rho(\boldsymbol{x})\rangle_{\mathrm{r}}&=-e\delta\langle\hat{n}(\boldsymbol{x})\rangle_{\mathrm{r}}\\&=-Ze\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\frac{4\alpha r_{\mathrm{s}}\pi^{-1}g(q/k_{\mathrm{F}})}{(q/k_{\mathrm{F}})^2+4\alpha r_{\mathrm{s}}\pi^{-1}g(q/k_{\mathrm{F}})}\end{aligned} \tag{3.4.11}$$

这个公式有下面的性质:

1. 总感应电荷密度是

$$\begin{aligned}\delta Q_{\mathrm{r}}&=\int\mathrm{d}^3x\,\delta\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle_{\mathrm{r}}\\&=-Ze\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\delta(\boldsymbol{q})\frac{4\alpha r_{\mathrm{s}}\pi^{-1}g(q/k_{\mathrm{F}})}{(q/k_{\mathrm{F}})^2+4\alpha r_{\mathrm{s}}\pi^{-1}g(q/k_{\mathrm{F}})}\\&=-Ze\end{aligned} \tag{3.4.12}$$

这表明在远处屏蔽是完全的.

2. (3.4.11)式中的被积函数对所有的 q 都是有界的, $q\to\infty$ 时它像 q^4 那样趋于零. 因此感应电荷密度处处有限(包括原点在内), 因为

$$\begin{aligned}|\delta\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle_{\mathrm{r}}|&\leqslant|\delta\langle\hat{\rho}(0)\rangle_{\mathrm{r}}|\\&=Ze\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{4\alpha r_{\mathrm{s}}\pi^{-1}g(q/k_{\mathrm{F}})}{(q/k_{\mathrm{F}})^2+4\alpha r_{\mathrm{s}}\pi^{-1}g(q/k_{\mathrm{F}})}<\infty\end{aligned} \tag{3.4.13}$$

第一个不等式是由振荡因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}$ 得到的, $\boldsymbol{x}\neq 0$ 时这个因子使电

荷密度减小.

3. 对小 q 值,q^{-2} 奇异性截止于 $q_{\min}$.

$$q_{\min}=\left(\frac{4\alpha r_s}{\pi}\right)^{1/2}k_F=\left(\frac{4k_F}{\pi a_0}\right)^{1/2}$$

$$=\left(\frac{6\pi ne^2}{\varepsilon_F^0}\right)^{1/2}=q_{TF} \tag{3.4.14}$$

q_{TF} 就是(3.1.35)引入的 k_{TF}.

感应电荷密度可以写为

$$\delta\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle_r=-Ze\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\frac{q_{TF}^2 g(q/k_F)}{q^2+q_{TF}^2 g(q/k_F)}$$

$$=-\frac{Ze}{2\pi^2 x}\int_0^\infty dq q\sin qx\frac{q_{TF}g(q/k_F)}{q^2+q_{TF}^2 g(q/k_F)} \tag{3.4.15}$$

$q=0$ 时,$g(0)=1$,若取这个近似则(3.4.15)式可以写为

$$\delta\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle_r=-\frac{Ze}{2\pi^2 x}\int_0^\infty dq q\sin qx\frac{q_{TF}^2}{q^2+q_{TF}^2}$$

$$=-\frac{Ze}{2\pi^2 x}\frac{1}{2i}\int_{-\infty}^\infty dq\frac{q_{TF}^2 q e^{iqr}}{q^2+q_{TF}^2}$$

在上半平面封闭积分回路,积分后得到

$$\delta\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle_r\approx-Zeq_{TF}^2\frac{e^{-q_{TF}x}}{4\pi x} \tag{3.4.16}$$

这个近似称为 Thomas-Fermi 近似. 屏蔽以后的电势也有相同的变化趋势, 即变成一个 Yukawa 势. 在远处屏蔽电荷降为零. 但这个结果只是近似正确的, 因为 $x=2$ 时 $g(x)$ 的一阶导数变为无穷, $g(x)$有$(q-2k_F)\ln(q-2k_F)$型的对数奇异性. 这个奇异性使 $\delta\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle_r$ 对 x 的渐近依赖关系不同于单极点 $q=\pm iq_{TF}$ 得到的指数形式(3.4.16) 式. 可用下面的方法研究 $\delta\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle_r$ 的渐近行为. 首先把 g 中的对数项写为

$$\ln\left|\frac{q-2k_F}{q+2k_F}\right|=\lim_{\eta\to 0}\frac{1}{2}\ln\frac{(q-2k_F)^2+\eta^2}{(q+2k_F)^2+\eta} \tag{3.4.17}$$

因为 g 是其宗量的偶函数，$\delta\langle\hat{\rho}(x)\rangle_{\mathrm{r}}$ 可写为

$$\delta\langle\hat{\rho}(x)\rangle_{\mathrm{r}}=\frac{Ze}{4\pi^2\mathrm{i}x}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}qq\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx}\left[\frac{q^2}{q^2+q_{\mathrm{TF}}^2g(q/k_{\mathrm{F}})}-1\right] \tag{3.4.18}$$

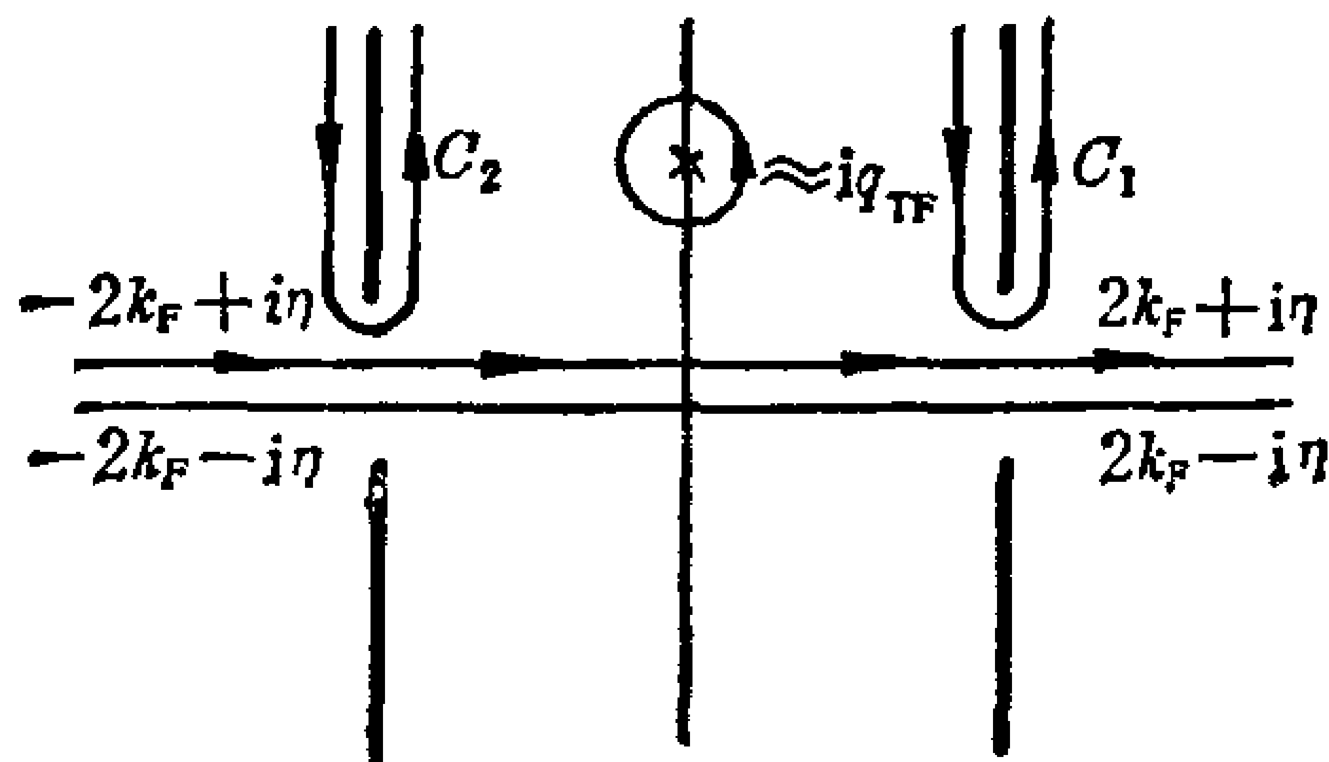


图 3.16

被积函数的解析结构表示在图 3.16 中．割线的选取使对数在实轴上取实数．积分回路变形后在点 $q=\mathrm{i}q_{\mathrm{TF}}$ 给出(3.4.16)式，$x\to\infty$时它趋于零．沿割线的积分决定于割线上岸和下岸被积函数的差，这个差是由对数的相位引起的，取下面的值

$$\Delta\left[\frac{1}{2}\ln\frac{(q-2k_{\mathrm{F}})^2+\eta^2}{(q+2k_{\mathrm{F}})^2+\eta^2}\right]=\begin{cases}\pi, & \text{在 } C_1\\ -\pi, & \text{在 } C_2\end{cases}$$

Δ 表示割线右边的相位减去左边的相位得到的数值．由于被积函数包含指数因子，所有慢变函数可以用割线起点的值代替．这样得到

$$\begin{aligned}\delta\langle\hat{\rho}(x)\rangle_{\mathrm{r}}&\underset{x\to\infty}{\approx}\frac{Ze}{4\pi^2\mathrm{i}x}\lim_{\eta\to0}\left(\int_{C_1}+\int_{C_2}\right)\mathrm{d}qq\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx}\\&\times\left(q^2\left\{q^2+q_{\mathrm{TF}}^2\left[\frac{1}{2}-\frac{k_{\mathrm{F}}}{2}\left(1-\frac{q^2}{4k_{\mathrm{F}}^2}\right)\frac{1}{2}\ln\frac{(q-2k_{\mathrm{F}})^2+\eta^2}{(q+2k_{\mathrm{F}})^2+\eta^2}\right]\right\}^{-1}-1\right)\\&\underset{x\to\infty}{\approx}\frac{Ze}{4\pi^2\mathrm{i}x}\lim_{\eta\to0}\left[\frac{\pi q_{\mathrm{TF}}^2}{4k_{\mathrm{F}}}\frac{8k_{\mathrm{F}}^3}{\left(4k_{\mathrm{F}}^2+\frac{1}{2}q_{\mathrm{TF}}^2\right)^2}\right.\\&\left.\times\left(\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}k_{\mathrm{F}}x}\mathrm{i}\int_{\eta}^{\infty}u\mathrm{e}^{-ux}\mathrm{d}u+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k_{\mathrm{F}}x}\mathrm{i}\int_{\eta}^{\infty}v\mathrm{e}^{-vx}\mathrm{d}v\right)\right]\end{aligned} \tag{3.4.19}$$

(3.4.19)式中沿 C_1 引入了 $q=2k_F+iv$，沿 C_2 引入了 $q=-2k_F+iu$. 完成积分后得到

$$\delta\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle_r \underset{x\to\infty}{\approx} \frac{Ze}{\pi}\frac{2\xi}{(4+\xi)^2}\frac{\cos(2k_F x)}{x^3}$$
$$\xi=\frac{q_{TF}^2}{2k_F} \tag{3.4.20}$$

这个结果是 Langer 和 Vosko 首先得到的，它与 Thomas-Fermi 近似不同，有长程振荡，是对(3.4.16)式的改进. 应该注意到，杂质附近的电子密度不仅有"堆积"即大于平均电子密度，而且有 $\delta\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{x})\rangle_r$ 小于零的区域，在这些区域电子实际上被"推开"了. 这个事实对有些现象如杂质之间的相互作用是很重要的.

屏蔽后杂质的有效势当 x 很大时也有下面的渐近形式

$$\varphi(\boldsymbol{x}) \underset{x\to\infty}{\approx} \frac{\cos(2k_F x)}{x^3}$$

称为 Friedel 振荡势. Friedel 势与 Yukawa 势有相同的屏蔽趋势，差别在于长程振荡.

§3.5 电子气中的元激发

电子气中有两种元激发，即个别激发和等离子体振荡(或称等离激元). §3-1 中已介绍了等离激元的基本概念，本节用格林函数方法统一讨论这两种元激发. 关于等离激元的物理图象还可进一步说明如下.

考虑均匀电子气，其平衡粒子密度 n_0 必等于正电荷基底的密度 n_b，以保持电中性. 设电子的局部密度起伏是 $\delta n(\boldsymbol{x}t)$，则有

$$n(\boldsymbol{x}t)=n_0+\delta n(\boldsymbol{x}t) \tag{3.5.1}$$

未补偿电荷引起电场 $\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{E}$ 满足 Poisson 方程

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}t)=-4\pi e[n(\boldsymbol{x}t)-n_b]=-4\pi e\delta n(\boldsymbol{x}t) \tag{3.5.2}$$

牛顿第二定律决定作用在小体积元中电子的力

$$m\frac{\mathrm{d}(n\boldsymbol{v})}{\mathrm{d}t}=m\left[\frac{\partial(n\boldsymbol{v})}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)(n\boldsymbol{v})\right]=-en\boldsymbol{E}$$

或近似写为

$$mn_0\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t}\approx -en_0\boldsymbol{E} \tag{3.5.3}$$

连续性方程可写为

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\nabla\cdot(n\boldsymbol{v})\approx\frac{\partial\delta n}{\partial t}+n_0\nabla\cdot v=0 \tag{3.5.4}$$

(3.5.3)式、(3.5.4)式已对小量 δn 和 $\boldsymbol{v}$ 线性化. (3.5.4)式对时间求导数，并与(3.5.2)式、(3.5.3)式的散度联合，可以得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\partial n(\boldsymbol{x}t)}{\partial t^2}&=-n_0\frac{\partial}{\partial t}\nabla\cdot\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}t)=\frac{en_0}{m}\nabla\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}t)\\&=-\frac{4\pi n_0e^2}{m}\delta n(\boldsymbol{x}t)\end{aligned}$$

或写为

$$\begin{aligned}&\frac{\partial^2\delta n(\boldsymbol{x}t)}{\partial t^2}=-\Omega_{\mathrm{pl}}\delta n(\boldsymbol{x}t)\\&\Omega_{\mathrm{pl}}^2=\frac{4\pi n_0e^2}{m}\end{aligned} \tag{3.5.5}$$

电子密度起伏 δn 将作简谐运动，其频率是 Ω_{pl}. 注意(3.5.5)式并不包含空间导数，因而没有质量输运. 这就是等离子体振荡或等离激元，是电子的一种集体激发.

除集体激发外电子气中还存在个别激发. 个别激发是从费密球内 $\boldsymbol{k}$ 态上拿出一个电子放在球外 $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ 空状态上去，形成一个电子和空穴的激发对. 个别激发的能量是(在自由电子近似下)

$$\varepsilon_{q\boldsymbol{k}}=\frac{1}{2m}[(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})^2-\boldsymbol{k}^2]=\frac{1}{2m}(q+2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q})$$

根据 § 3-3 节的讨论，电子气中的元激发由 $\Pi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$的极点或方程 $\kappa^{\mathrm{R}}=0$ 决定. 若用环图近似则有

$$\Pi_{\mathrm{r}}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\omega)}{1-V(q)\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\omega)} \tag{3.5.6}$$

$$\kappa_{\mathrm{r}}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)=1-V(q)\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\omega) \tag{3.5.7}$$

由此得到元激发的色散关系为

$$V(q)\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\omega)=1 \tag{3.5.8}$$

其中

$$\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\ \omega)=2\sum_{\substack{|\boldsymbol{k}|\leqslant k_{\mathrm{F}}\\|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|>k_{\mathrm{F}}}}\left(\frac{1}{\omega-\varepsilon_{qk}+\mathrm{i}\eta}-\frac{1}{\omega+\varepsilon_{qk}+\mathrm{i}\eta}\right) \tag{3.5.9}$$

对于固定的 q，ε_{qk} 取一系列准连续的值. ε_{qk} 等于不计相互作用时激发一个电子-空穴对的能量. ε_{qk} 的最大值和最小值是

$$\omega_{\max}=\frac{k_{\mathrm{F}}q}{m}+\frac{q^2}{2m} \tag{2.5.10}$$

$$\omega_{\min}=\begin{cases}0, & q<2k_{\mathrm{F}}\\ \dfrac{q^2}{2m}-\dfrac{k_{\mathrm{F}}q}{m}, & q\geqslant 2k_{\mathrm{F}}\end{cases} \tag{2.5.11}$$

电子-空穴对激发态存在的频率区间是 $\omega_{\min}<\omega<\omega_{\max}$. 对于一定的 q 值考虑 $V(q)\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\ \omega)$ 随 ω 的变化. (3.5.8) 式左边可写为

$$V(q)\mathrm{Re}\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\ \omega)=2V(q)\sum_{\substack{|\boldsymbol{k}|\leqslant k_{\mathrm{F}}\\|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|>k_{\mathrm{F}}}}\frac{2\varepsilon_{qk}}{\omega^2-\varepsilon_{qk}^2} \tag{3.5.12}$$

它是 ω 的偶函数，因而只需讨论 $\omega>0$ 的部分. 当 ω 略大于某一个 ε_{qk} 值时 $V(q)\mathrm{Re}\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\omega)$ 变为∞，略小于它时变为 $-\infty$. $\omega>\omega_{\max}$ 并趋于无穷时 $V(q)\mathrm{Re}\Pi^{\mathrm{OR}}$ 按 ω^{-2} 趋于 0. 对长波极限 $\omega_{\min}=0$. (3.5.12) 式的函数如图 3-17所示. 图中曲线与通过纵轴上 (+1) 点的水平线的交点决定方程(3.5.8)式的根，给出系统的激发谱. $\omega<\omega_{\max}$ 的一系列交点给出有相互作用时电子-空穴对个别激发的能谱. 由于各 ε_{qk} 值之间的差别很小（图中是放大了

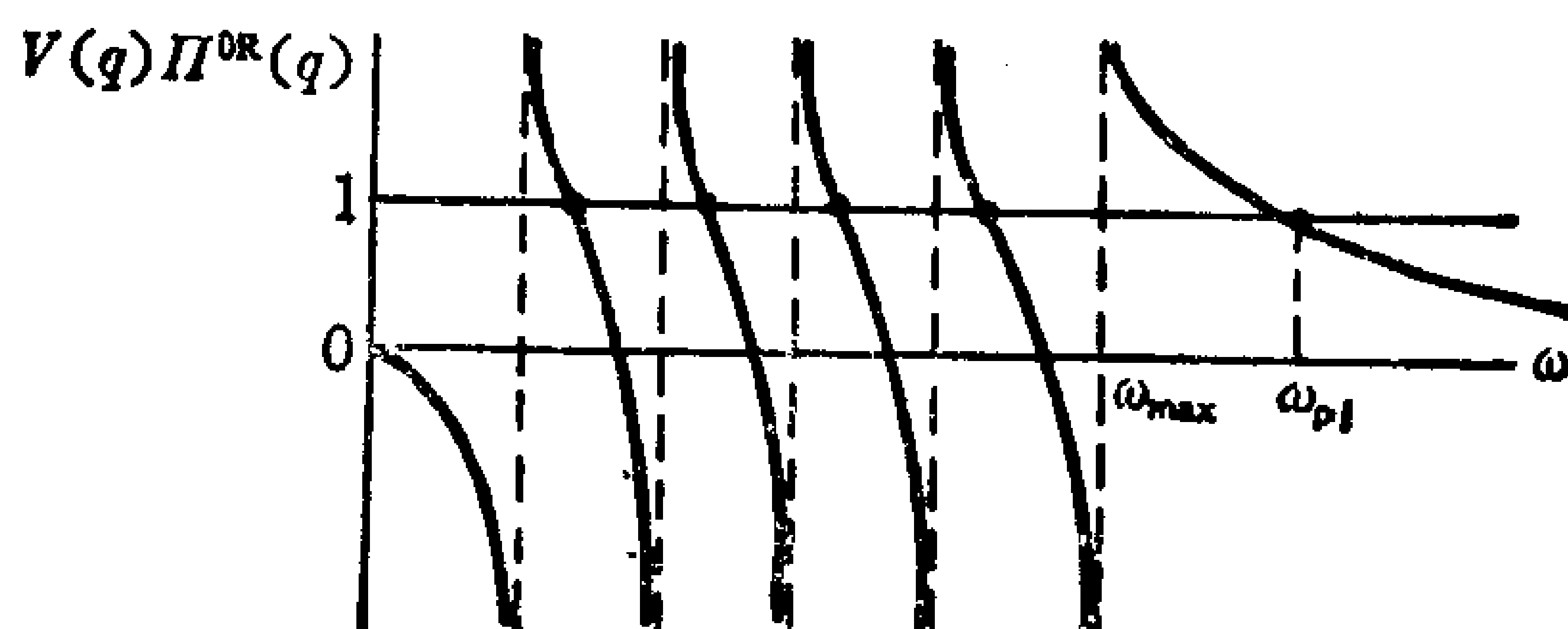


图 3.1

的)，因此相互作用只使它们发生很小的能级移动，这是一个准连续能谱．$\omega>\omega_{max}$ 时(3.5.8) 还有一个从准连续谱顶部分出的高频根 ω_{pl}，它代表系统的集体激发．在长波极限

$$\Pi^{OR}_{q\to 0}(q_0,\omega)=\frac{nq^2}{m\omega^2}$$

色散关系(3.5.8)式变为

$$1=V(q)\mathrm{Re}\Pi^{OR}(q,\ \omega_{pl})=\frac{4\pi ne^2}{m\omega_{pl}^2} \tag{3.5.13}$$

由此得到

$$\omega_{pl}=\left(\frac{4\pi ne^2}{m}\right)^{1/2} \tag{3.5.14}$$

这正是等离子区电子集体振荡的频率．

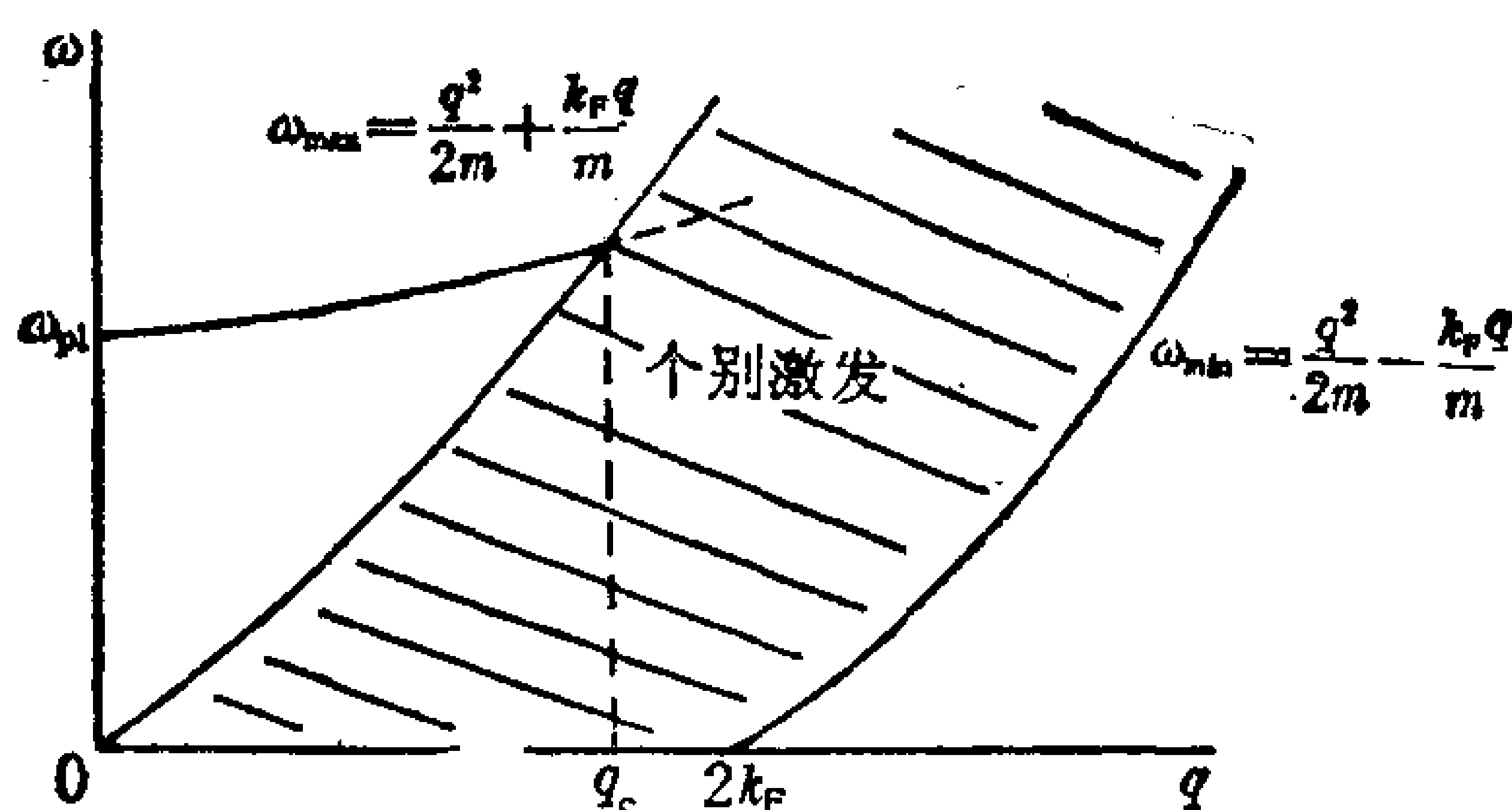


图 3.18

在 ω-q 图上电子气的元激发可表示为图 3.18．其中阴影部

分表示独立的电子-空穴激发即个别激发.

下面进一步讨论等离激元. 为了研究 q 很小但不等于零时等离激元的色散关系, 设 $\kappa^{R}(\boldsymbol{q},\omega)$ 的零点位于 $\Omega_q-\mathrm{i}\gamma_q$, 则 (3.5.8) 式变为

$$1=V(q)\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\Omega_q-\mathrm{i}\gamma_q) \tag{3.5.15}$$

一般说来, 这个方程要用数值解法. 如果阻尼很小, 即 $\gamma_q\ll\Omega_q$, 则 Π^{OR} 的实数部分和虚数部分可以分开, 我们有

$$1=V(q)\mathrm{Re}\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\Omega_q)=V(q)\mathrm{Re}\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\Omega_q) \tag{3.5.16}$$

$$\begin{aligned}\gamma_q&=\mathrm{Im}\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\Omega_q)\left[\left.\frac{\partial\mathrm{Re}\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\omega)}{\partial\omega}\right|_{\Omega_q}\right]^{-1}\\&=\mathrm{sgn}\Omega_q\mathrm{Im}\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\Omega_q)\left[\left.\frac{\partial\mathrm{Re}\Pi^{0}(\boldsymbol{q},\omega)}{\partial\omega}\right|_{\Omega_q}\right]^{-1}\end{aligned} \tag{3.5.17}$$

(3.5.16)式决定集体模的色散关系, (3.5.17)式给出等离子体的阻尼常数.

现在研究 $q\to0$ 时 Π^{OR} 的展开. $\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\omega)$ 可写为

$$\begin{aligned}\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\omega)&=-2\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}n_{\boldsymbol{k}}^{0}\left[\frac{1}{\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}^{0})+\mathrm{i}\eta}\right.\\&\qquad\left.-\frac{1}{\omega-(\varepsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^{0}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0})+\mathrm{i}\eta}\right]\\&=\frac{2q^2}{m}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}n_{\boldsymbol{k}}^{0}\frac{1}{(\omega-\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}/m+\mathrm{i}\eta)^2-(q^2/2m)^2}\end{aligned} \tag{3.5.18}$$

显然, 如果 $|\omega|>k_{\mathrm{F}}q/m+q^2/2m$, 则 $\mathrm{Im}\Pi^{\mathrm{OR}}=0$. 在这个区域 $\mathrm{Re}\Pi^{\mathrm{OR}}=\mathrm{Re}\Pi^{0}$, 并可展为 q 的升幂级数. 取到 q^4 有下面的结果

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\Pi^{\mathrm{OR}}(\boldsymbol{q},\omega)&=\frac{2q^2}{m\omega^2}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}n_{\boldsymbol{k}}^{0}\left[1+\frac{2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}}{m\omega}+3\left(\frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}}{m\omega}\right)^2+\cdots\right]\\&=\frac{k_{\mathrm{F}}^3}{3\pi^2}\frac{q^2}{m\omega^2}\left[1+\frac{3}{5}\left(\frac{k_{\mathrm{F}}q}{m\omega}\right)^2+\cdots\right]\end{aligned} \tag{3.5.19}$$

因为

$$2\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}n_k^0=\frac{N}{V}=\frac{k_\mathrm{F}^3}{3\pi^2} \tag{3.5.20}$$

色散关系(3.5.16)式变为

$$1=\frac{4\pi ne^2}{m\Omega_q^2}\left[1+\frac{3}{5}\left(\frac{k_\mathrm{F}q}{m\Omega_q}\right)^2+\cdots\right] \tag{3.5.21}$$

用重复的方法求解得到

$$\Omega_q=\pm\Omega_\mathrm{pl}\left[1+\frac{9}{10}\left(\frac{q}{q_\mathrm{TF}}\right)^2+\cdots\right] \tag{3.5.22}$$

这是 q 小时对(3.5.14)式的修正.

在图 3-18 中当 $q=q_c$ 时，等离子体的色散曲线与个别激发相交. $q<q_c$ 时等离激元的能量大于电子-空穴对个别激发的能量，这时 $\mathrm{Im}\Pi^0=0$，根据(3.5.17)式等离激元不衰减为电子-空穴对. 电子-空穴对也没有足够的能量激发等离激元，二者彼此独立. $q>q_c$ 时，$\mathrm{Im}\Pi^0\neq0$，等离子体振荡变为不稳定的，这时只有个别激发. 所以只在 $0<q<q_c$ 范围内才存在集体激发. q_c 是划分个别激发与集体激发的一个重要参数.

§3.6 热力学势的微扰计算和相关能

本节用松原函数计算相互作用电子气的热力学势. 计算的结果对高温经典极限和低温量子极限都是适用的. 但我们只限于讨论低温极限和电子气的相关能.

一、近似本征自能

电子气的物理模型已在§3-1中介绍过了. 因为均匀的正电荷基底抵消了 $q=0$ 分量，所以 $\mathscr{G}$ 的图形展开中不包含 $V(0)$ 的项. 由热力学势 $\Omega(T, V, \mu)$ 可计算电子气平衡态的热力学性质. 由(2.4.11)式，Ω 的公式是

$$\Omega(T,V,\mu)=\Omega_0(T,V,\mu)$$

$$+V\int_0^1\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\eta}\Sigma^{*\lambda}(\boldsymbol{k},\omega_n)\mathscr{G}^\lambda(\boldsymbol{k},\omega_n) \tag{3.6.1}$$

$\Sigma^{*\lambda}$ 和$\mathscr{G}^\lambda$ 是相互作用势 $\lambda V(q)$的函数，(3.6.1)式已对自旋求和. 在相互作用电子气中耦合常数是 e^2. 将Ω展开为e^2 的幂级数时二级项是发散的. 因此需要对选定的一类高级图求和，以得到有限的结果. 我们将相互作用的效应限制在本征自能中而将$\mathscr{G}$写为 $\mathscr{G}=\mathscr{G}^0+\mathscr{G}^0\Sigma^*\mathscr{G}^0+\cdots$，这样(3.6.1)式中的被积函数变为

$$\Sigma^*\mathscr{G}^0+\Sigma^*\mathscr{G}^0\Sigma^*\mathscr{G}^0+\cdots$$

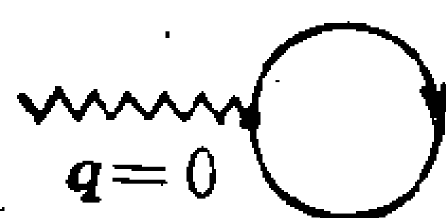


图 3.19

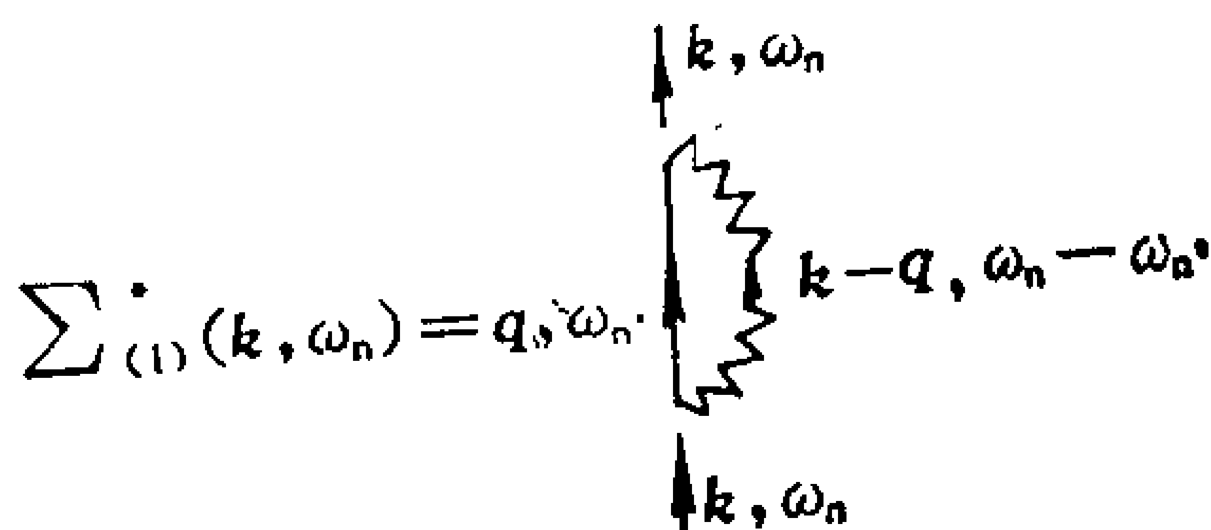


图 3.20

条件 $V(0)=0$ 表示所有包含图3.19的因子的贡献等于零. 一级本征自能只包括图3.20一项. 其中 V_0 的定义是(2.3.4)式. $n_q^0=[\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_q^0-\mu)}+1]^{-1}$，是化学势$\mu$的函数.

$$\Sigma^*_{(1)}(\boldsymbol{k},\omega_n)=-\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_{n'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{n'}\eta}V_0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\omega_n-\omega_{n'})\mathscr{G}^0(\boldsymbol{q},\omega_{n'})$$

$$=-\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})n_q^0 \tag{3.6.2}$$

相应于一级自能的热力学势是

$$\Omega_1(T,V,\mu)=V\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\eta}\Sigma^*_{(1)}(\boldsymbol{k},\omega_n)\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k},\omega_n) \tag{3.6.3}$$

将(3.6.2)式代入(3.6.3)式并完成积分得到

$$\Omega_1(T\ V,\ \mu)=-V\int\frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^6}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})n_k^0n_q^0 \qquad (3.6.4)$$

式中已完成了对 λ 的积分. 如果取近似 $\Omega=\Omega_0+\Omega_1$,则由计算得到的低温比热像 $-T(\ln T)^{-1}$ 那样变化. 它与金属比热的实验结果不符合,因而需要研究高级项. Σ^* 的二级项示于图 3.21. 本

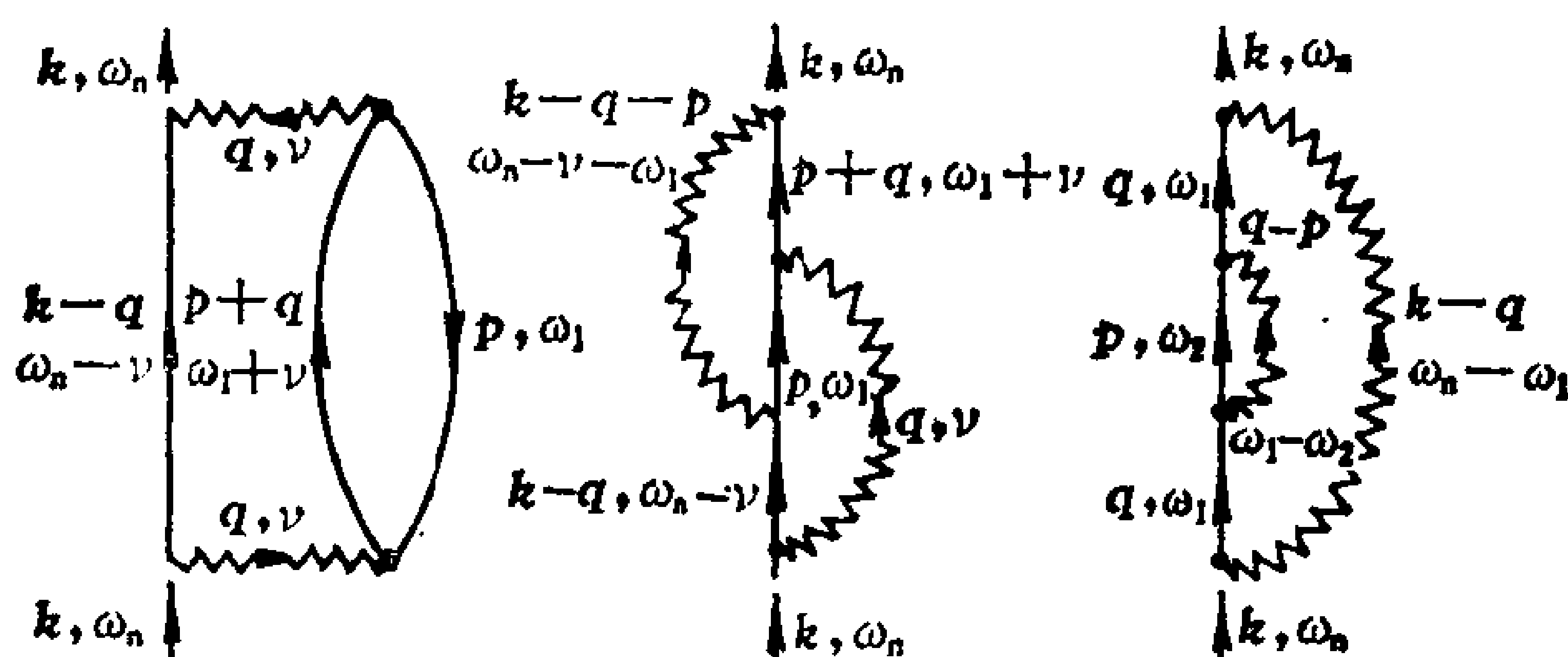


图 3.21

节用 ν 表示偶数频率,用 ω 表示奇数频率. 图 3-21 中各项的表达式如下

$$\begin{aligned}&\Sigma^*_{(2)\mathrm{r}}(\boldsymbol{k},\omega_n)\\&=(-2)\frac{1}{\beta^2}\sum_{\omega_1,\nu}\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^6}[V(\boldsymbol{q})]^2\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p},\omega_1)\\&\quad\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q},\omega_1+\nu)\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\omega_n-\nu)\end{aligned} \qquad (3.6.5)$$

$$\begin{aligned}\Sigma^*_{(2)\mathrm{b}}(\boldsymbol{k},\ \omega_n)=&\frac{1}{\beta^2}\sum_{\omega_1,\nu}\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^6}V(\boldsymbol{q})V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}-\boldsymbol{p})\\&\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\omega_n-\nu)\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p},\omega_1)\\&\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q},\omega_1+\nu)\end{aligned} \qquad (3.6.6)$$

$$\begin{aligned}\Sigma^*_{(2)\mathrm{c}}(\boldsymbol{k},\ \omega_n)=&\frac{1}{\beta^2}\sum_{\omega_1,\omega_2}\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^6}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})V(\boldsymbol{q}\\&-\boldsymbol{p})\mathscr{G}^0(\boldsymbol{q},\omega_1)\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p},\omega_2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_2\eta}\mathscr{G}^0(\boldsymbol{q},\omega_1)\end{aligned} \qquad (3.6.7)$$

(3.6.5)式中 Σ^* 的角标 r 表示环图近似, 前面的因子(-2)是由

自旋求和与封闭费米环引起的. $\Sigma^{*}_{(2)c}$ 中的因子 $e^{i\omega_2\eta}$ 是因为相互作用线 $V(q-p)$ 连结同一粒子线 $\mathscr{G}^0(p,\omega_2)$ 的两端. 虽然所有三项形式上都与 e^4 成正比, 但第一项与其它两项不同. 每项中频率求和产生费密分布函数 n^0, 但并不改变动量积分的性质. $\Sigma^{*}_{(2)r}\propto e^4\int d^3q q^{-4}$, 对积分下限 $q\to 0$ 发散. 而 $\Sigma^{*}_{(2)b}$ 和 $\Sigma^{*}_{(2)c}$ 是收敛的. 因此我们不能限于 Σ^* 的一级项与二级项, 而必须研究高级项.

$\Sigma^{*}_{(2)r}$ 发散的原因是每个相互作用线有相同的动量输运 q, 而其它图中两个波纹线有不同的动量. 高级图中有类似的结构. 三

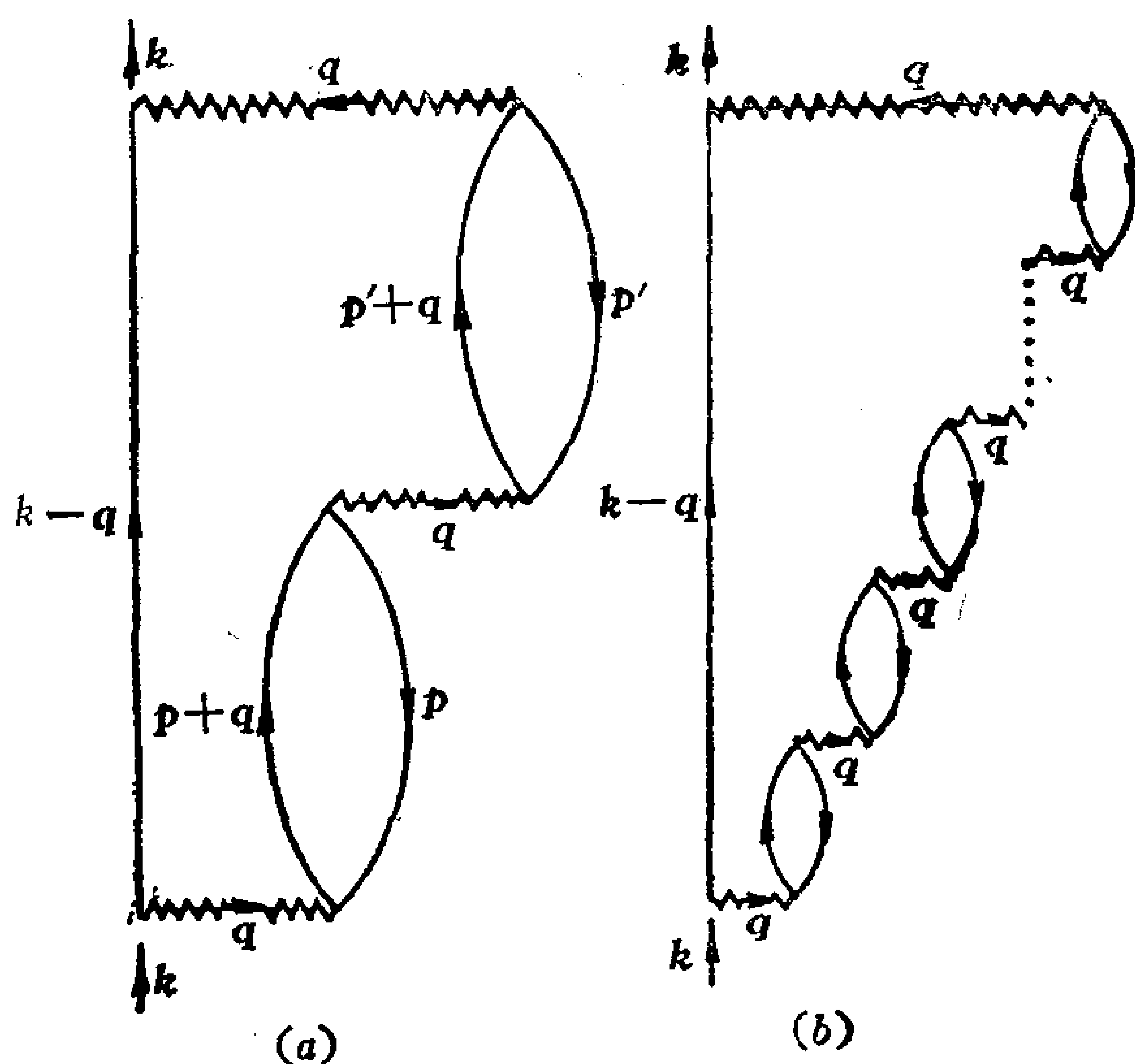


图 3.22

级本征自能包含图 $\Sigma^{*}_{(3)r}$ 如图 3.22(a), 这一项是三级项中最发散的项 $\propto e^6\int d^3q q^{-6}$. n 级项中最发散的项为 $\Sigma^{*}_{(n)r}\propto\int d^3q[V(q)]^n$, 如图 3.22($b$). 电子气理论的基本近似是保留最发散的高级项及第一级、第二级的贡献, 即取

$$\Sigma^* \approx \Sigma^*_{(1)} + \Sigma^*_{(2)b} + \Sigma^*_{(2)c} + \sum_{n=2}^{\infty} \Sigma^*_{(n)r}$$

$$= \Sigma^*_{(1)} + \Sigma^*_{(2)b} + \Sigma^*_{(2)c} + \Sigma^*_r \tag{3.6.8}$$

二、环图近似

引入有效势 V_r 可比较容易地计算 Σ^*_r. V_r 的图形示于图 3.23 中，其表达式为

$$V_r(\boldsymbol{q}, \nu_n) = V_0(\boldsymbol{q}, \nu_n) + V_0(\boldsymbol{q}, \nu_n)\Pi^0(\boldsymbol{q}, \nu_n)V_0(\boldsymbol{q}, \nu_n) + \cdots$$
$$= V_0(\boldsymbol{q}, \nu_n) + V_0(\boldsymbol{q}, \nu_n)\Pi^0(\boldsymbol{q}, \nu_n)V_r(\boldsymbol{q}, \nu_n) \tag{3.6.9}$$

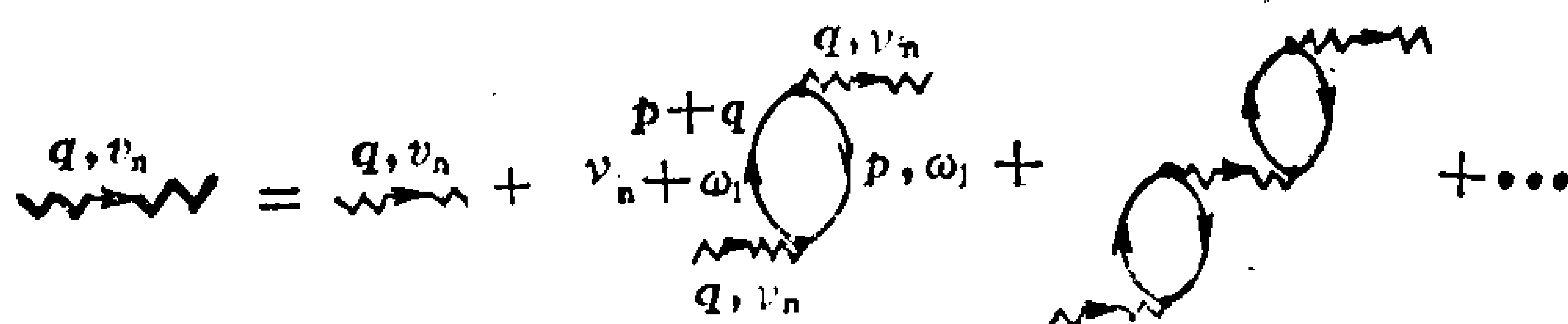


图 3.23

Π^0 代表最低级的本征极化. 由(3.6.9)式可以解出

$$V_r(\boldsymbol{q}, \nu_n) = V_0(\boldsymbol{q}, \nu_n)[1 - V_0(\boldsymbol{q}, \nu_n)\Pi^0(\boldsymbol{q}, \nu_n)]^{-1}$$
$$= V(\boldsymbol{q})[1 - V(\boldsymbol{q})\Pi^0(\boldsymbol{q}, \nu_n)]^{-1} \tag{3.6.10}$$

写出图 3-23 头两项的公式即可得到 $\Pi^0(\boldsymbol{q}, \nu_n)$ 的解析表达式

$$V_r(\boldsymbol{q}, \nu_n) = V_0(\boldsymbol{q}, \nu_n)$$
$$+ [V_0(\boldsymbol{q}, \nu_n)]^2(-1)(-2)\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_1}\int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3}\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p},$$
$$\omega_1)\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p} + \boldsymbol{q}, \omega_1 + \nu_n) + \cdots$$

第二项中的因子(−1)是由于第二项 V_0 的幂比第一项高一次方引起的. (−2)是封闭费密环和对自旋求和的结果. 与(3.6.9)式比较可以得到

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},\ \nu_n)=\frac{2}{\beta}\sum_{\omega_1}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p},\omega_1)\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q},\omega_1+\nu_n)$$

$$=2\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_1}\left[\frac{1}{\mathrm{i}\omega_1-(\varepsilon_p^0-\mu)}\cdot\frac{1}{\mathrm{i}\omega_1+i\nu_n-(\varepsilon_{p+q}^0-\mu)}\right] \tag{3.6.11}$$

它与(3.2.11)式很相似. $|\omega_1|\to\infty$时频率求和的项与$|\omega_1|^{-2}$成正比,因而求和是绝对收敛的. (3.6.11)式可以用回路积分求出. 为了利用公式(2.3.23)式,引入收敛性因子$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1\eta}$,将(3.6.11)式分解为两项之和,每项用(2.3.23)式求和. 我们得到

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},\ \nu_n)=2\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\mathrm{i}\nu_n-(\varepsilon_{p+q}^0-\varepsilon_p^0)}\times\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1\eta}\left[\frac{1}{\mathrm{i}\omega_1-(\varepsilon_p^0-\mu)}-\frac{1}{\mathrm{i}\omega_1+\mathrm{i}\nu_n-(\varepsilon_{p+q}^0-\mu)}\right]$$

$$=-2\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\frac{n_{p+q}^0-n_p^0}{\mathrm{i}\nu_n-(\varepsilon_{p+q}^0-\varepsilon_p^0)} \tag{3.6.12}$$

计算中用了等式$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\nu_n}=1$. n_p^0依赖于参量μ,而μ又与粒子数N/V有关,但只在计算的最后利用这个关系.

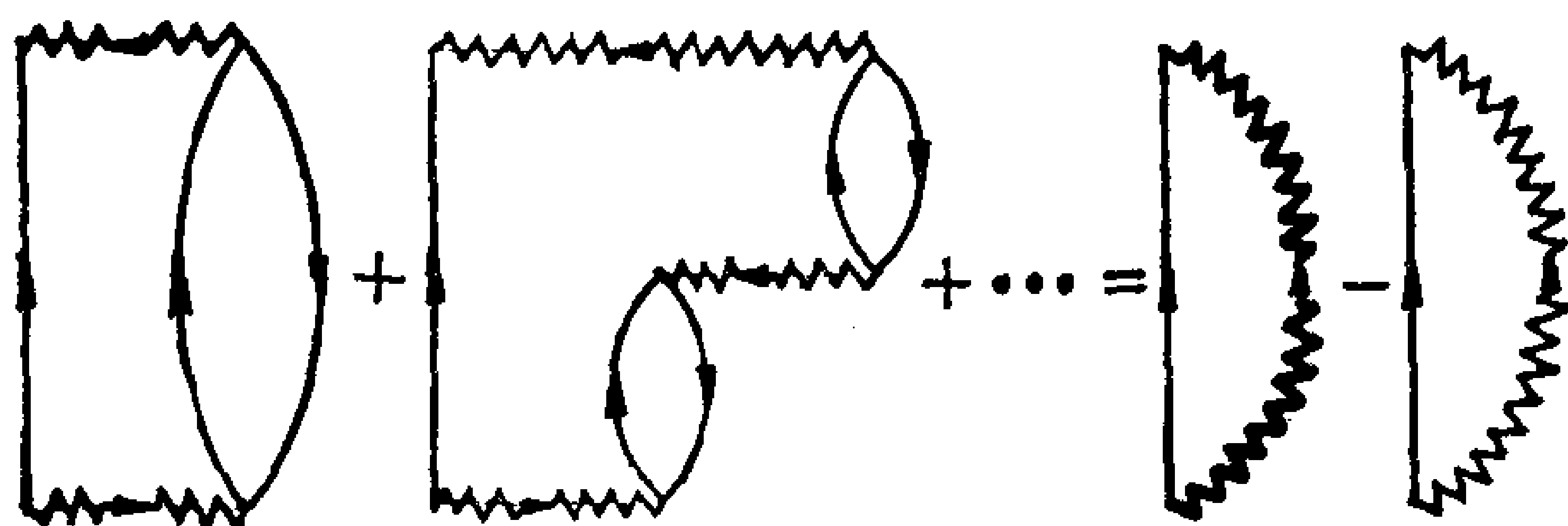


图 3.24

可以用V_r直接计算$\Sigma_r^*(\boldsymbol{k},\omega_n)$如图3-24所示.

$$\Sigma_{\mathrm{r}}^{*}(\boldsymbol{k},\ \omega_n)=(-1)\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_{\nu_n}[V_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},\nu_n)-V_0(\boldsymbol{q},\nu_n)]\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\omega_n-\nu_n)\quad(3.6.13)$$

(3.6.12)式表明$|\nu_n|\to\infty$时$\Pi^0(\boldsymbol{q},\ \nu_n)$像$|\nu_n|^{-1}$那样趋于零．差$V_{\mathrm{r}}-V_0$也有这个性质，这保证了$\Sigma_{\mathrm{r}}^{*}$的频率求和的绝对收敛．(3.6.13)式方括弧中的量可重写如下

$$V_{\mathrm{r}}(\boldsymbol{q},\nu_n)-V_0(\boldsymbol{q},\nu_n)=\frac{V(\boldsymbol{q})}{1-V(q)\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)}-V(\boldsymbol{q})$$

$$=\frac{[V(q)]^2\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)}{1-V(\boldsymbol{q})\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)}\qquad(3.6.14)$$

Σ_{r}^{*}可写为

$$\Sigma_{\mathrm{r}}^{*}(\boldsymbol{k},\omega_n)=-\frac{1}{\beta}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\sum_{\nu_n}\frac{[V(\boldsymbol{q})]^2\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)}{1-V(\boldsymbol{q})\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)}\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\omega_n-\nu_n)\qquad(3.6.15)$$

三、热力学势的近似计算

现在计算热力学势．(3.6.1) 式的被积函数相应于加一个因子$\mathscr{G}^0$连接$\Sigma^*+\Sigma^*\mathscr{G}^0\Sigma^*+\cdots$的两端而形成封闭环．由$\Sigma_{(1)}^{*}$、$\Sigma_{(2)\mathrm{b}}^{*}$、$\Sigma_{(2)\mathrm{c}}^{*}$和$\Sigma_{\mathrm{r}}^{*}$分别得到$\Omega_1$、$\Omega_{2\mathrm{b}}$、$\Omega_{2\mathrm{c}}$和$\Omega_{\mathrm{r}}$如图 3-25 所示．$\Omega_1$已经求出如 (3.6.4) 式．二级供献$\Omega_{2\mathrm{d}}$是由$\Sigma_{(1)}^{*}$的重复得到的．$\Omega_{\mathrm{r}}$包含最重要的物理效应．由图 3.25 可以看出，$\Omega_{2\mathrm{c}}$和$\Omega_{2\mathrm{d}}$是拓朴等价的，计算表明它们是相等的．可以求出

$$\Omega_{2\mathrm{b}}(T,V,\mu)=V\int\frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^9}\frac{V(\boldsymbol{q})V(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})n_{\boldsymbol{k}}^0n_{\boldsymbol{p}}^0(1-n_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^0)(1-n_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}^0)}{\varepsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^0+\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}^0-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}^0}\qquad(3.6.16)$$

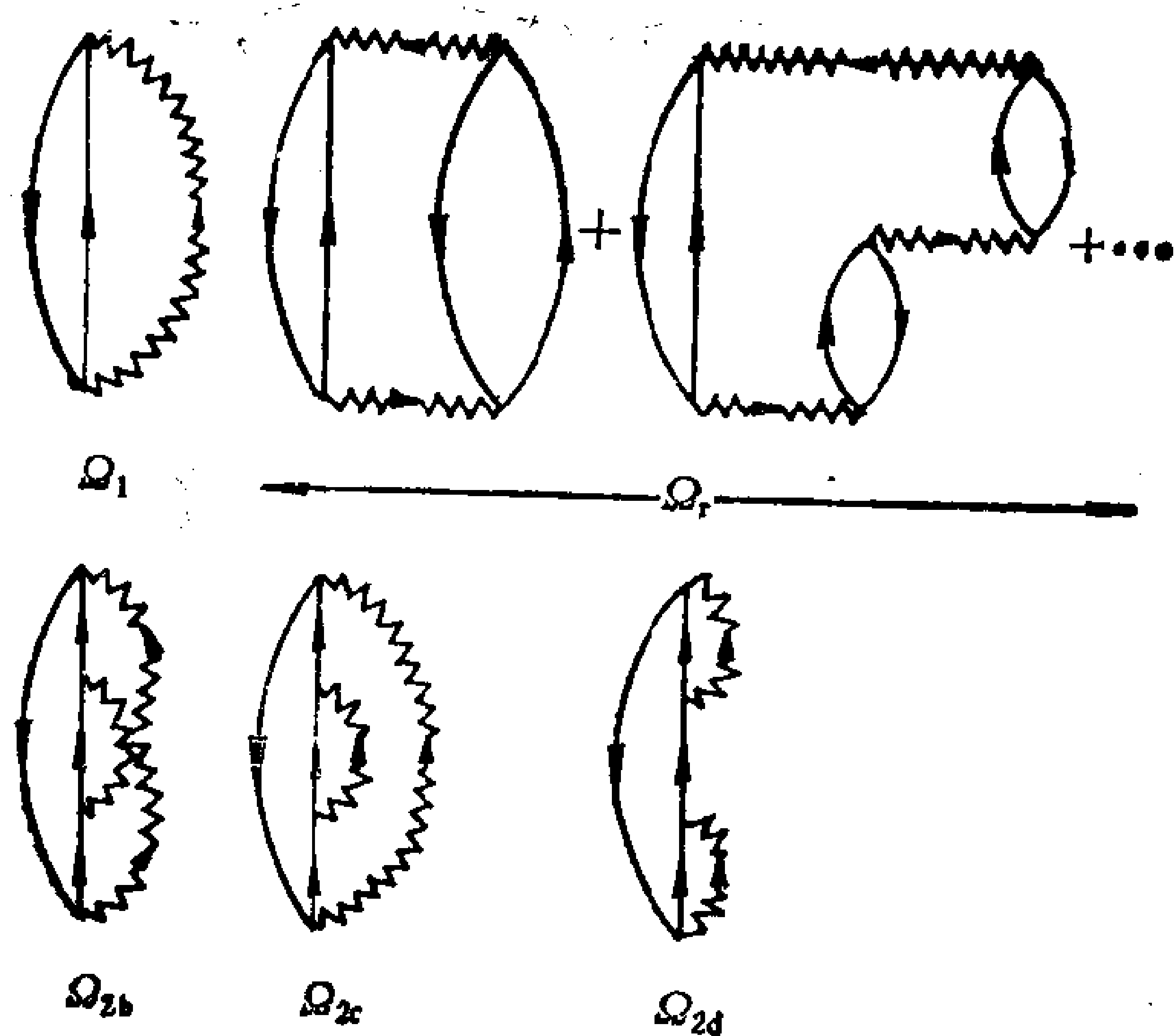


图 3.25

$$\Omega_{2c}(T,V,\mu)=\Omega_{2d}(T,V,\mu)$$
$$=-\frac{V}{2}\beta\int\frac{d^3k d^3p d^3q}{(2\pi)^9}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})$$
$$\times V(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q})n_k^0 n_p^0 n_q^0(1-n_q^0) \tag{3.6.17}$$

总的热力学势是

$$\Omega=\Omega_0+\Omega_1+\Omega_r+\Omega_{2b}+2\Omega_{2c} \tag{3.6.18}$$

以上公式适用于二体势，对于电子气 Ω_r 可写为

$$\Omega_r(T,V,\mu)$$
$$=V\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_{\nu_n}e^{i\omega_n\eta}\Sigma_r^{*\lambda}(\boldsymbol{k},\omega_n)\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k},\omega_n)$$
$$=-V\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_{\nu_n}\frac{\lambda^2[V(\boldsymbol{q})]^2\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)}{1-\lambda V(\boldsymbol{q})\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)}$$
$$\times\left[\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta}\sum_{\nu_n}e^{i\omega_n\eta}\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\omega_n-\nu_n)\mathscr{G}^0(\boldsymbol{k},\omega_n)\right]$$
$$\tag{3.6.19}$$

Σ_r^* 取了(3.6.15)式的形式．与(3.6.11) 式比较可看出方括弧中

的量正是$\frac{1}{2}\Pi^0(\boldsymbol{q},\ \nu_n)$. 因为$\mathscr{G}^0$与$\lambda$无关，很容易完成对$\lambda$的积分.

$$\Omega_{\mathrm{r}}=-\frac{V}{2\beta}\sum_{\nu_n}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\int_0^1\frac{\mathrm{d}\lambda}{\lambda}\ \frac{\lambda^2[V(\boldsymbol{q})\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)]^2}{1-\lambda V(\boldsymbol{q})\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)}$$

$$=\frac{V}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\ \frac{1}{\beta}\sum_{\nu_n}\{\ln[1-V(\boldsymbol{q})\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)]$$

$$+V(\boldsymbol{q})\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)\} \qquad (3.6.20)$$

如果将(3.6.20)式展开为e^2的幂级数则第一项为e^4级，因为不存在一级项.

进一步计算需要$\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)$的公式. 我们首先证明

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)=\Pi^0(\boldsymbol{q},-\nu_n) \qquad (3.6.21)$$

在(3、6、12)的分子中加、减$n^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}n^0_{\boldsymbol{p}}$，得到

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)=-2\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\ \frac{n^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}(1-n^0_{\boldsymbol{p}})-n^0_{\boldsymbol{p}}(1-n^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}})}{\mathrm{i}\nu_n-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}})}$$

假定分布函数是各向同性的，在第一项中作变换$\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\to-\boldsymbol{p}$，得到

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)=-2\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}n^0_{\boldsymbol{p}}(1-n^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}})$$

$$\times\left[\frac{1}{\mathrm{i}\nu_n-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}})}-\frac{1}{\mathrm{i}\nu_n-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}})}\right]$$

$$=-4\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}n^0_{\boldsymbol{p}}(1-n^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}})$$

$$\times\frac{\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}}{(\mathrm{i}\nu_n)^2-(\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}})^2} \qquad (3.6.22)$$

这证明了(3.6.21)式. 从以上计算可以看出，Π^0是$\boldsymbol{q}$的偶函数，当$|\nu_n|\to\infty$时Π^0像ν_n^{-2}那样变化.

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu_n)\underset{|\nu_n|\to\infty}{\approx}\frac{4}{\nu_n^2}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}n^0_{\boldsymbol{p}}(1-n^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}})(\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}}-\varepsilon^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}) \quad (3.6.23)$$

四、低温极限

Ω_1、Ω_{2b} 和 Ω_{2c} 的公式对低温计算也是方便的，困难在于计算 Ω_r，Ω_r 是对 Ω_1 的主要修正而且包含长波行为. 因为 $T\to 0$ 时相邻的 ν_n 值之差趋于零，所以可用连续积分 $\int d\nu/2\pi$ 代替频率求和 $\frac{1}{\beta}\sum_{\nu_n}$,

$$\Omega_r(T=0,V,\mu)=\frac{V}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\nu}{2\pi}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\Big\{\ln[1-V(q)\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu)] + V(q)\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu)\Big\} \tag{3.6.24}$$

为了下面的计算需要求出 q 小时的 Π^0，由(3.6.12)式有，

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu)=-2\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\ \frac{n^0_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-n^0_{\boldsymbol{p}}}{i\nu-(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q}+\frac{1}{2}q^2)/m}$$

$$\underset{q\to 0}{\approx}-2\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\ \frac{\boldsymbol{q}\cdot\nabla_{\boldsymbol{p}}n^0_{\boldsymbol{p}}}{i\nu-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q}/m} \tag{3.6.25}$$

上式已在分母中忽略了 q^2 项. $T=0$ 时 $n^0_{\boldsymbol{p}}$ 是阶梯函数，它的梯度为 $\nabla_{\boldsymbol{p}}n^0_{\boldsymbol{p}}=-\boldsymbol{p}\delta(p-k_0)$，$k_0$ 的定义是

$$k_0\equiv(2m\mu)^{1/2} \tag{3.6.26}$$

完成(3.6.25)式中的积分，我们得到

$$\Pi^0(\boldsymbol{q},\nu)=-\frac{k_0m}{2\pi^2}\int_{-1}^{1}\frac{z\,dz}{z-im\nu/qk_0}$$

$$=-\frac{k_0m}{\pi^2}R(x)\quad q\to 0 \tag{3.6.27}$$

其中

$$x=\frac{m\nu}{qk_0} \tag{3.6.28}$$

$$R(x)=\int_0^1\frac{z^2dz}{z^2+x^2}=1-x\arctan\frac{1}{x} \tag{3.6.29}$$

引入无量纲参量 x 和 $\zeta=q/k_0$, 则 Ω_r 可写为

$$\Omega_r=\frac{Vk_0^5 4\pi}{2m(2\pi)^4}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\int_0^{\infty}\zeta^3\mathrm{d}\zeta\left\{\ln\left[1-\frac{4\pi e^2}{k_0^2\zeta^2}\left(k_0\zeta,\ \frac{k_0^2 x\zeta}{m}\right)\right]\right.$$

$$\left.+\frac{4\pi e^2}{k_0^2\zeta^2}\Pi^0\left(k_0\zeta,\frac{k_0^2 x\zeta}{m}\right)\right\} \qquad (3.6.30)$$

若把(3.6.30)式展开为幂级数，则每一项对 ζ 的积分下限都是发散的,因此(3.6.30)式不能直接展开为 e^2 的幂级数.

我们把对 ζ 的积分分为两部分：从 0 到 $\zeta_0\ll1$ 和从 ζ_0 到 ∞. 对$\zeta<\zeta_0$ 可以用近似(3.6.27)式. 对 $\zeta>\zeta_0$,只要 ζ_0 是有限的，被积函数就可以展为 e^2 的幂级数,而且只保留到 e^4 项. 由此得到

$$\Omega_r=\Omega_{r1}+\Omega_{r2} \qquad (3.6.31)$$

其中

$$\Omega_{r1}=\frac{Vk_0^5}{8\pi^3 m}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\int_0^{\zeta_0}\zeta^3\mathrm{d}\zeta\left\{\ln\left[1+\frac{4m}{k_0\pi}\left(\frac{e}{\zeta}\right)^2R(x)\right]\right.$$

$$\left.-\frac{4m}{k_0\pi}\left(\frac{e}{\zeta}\right)^2R(x)\right\} \qquad (3.6.32)$$

$$\Omega_{r2}\approx-\frac{1}{2}\frac{Vk_0^5}{8\pi^3 m}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\int_{\zeta_0}^{\infty}\zeta^3\mathrm{d}\zeta\left[\frac{4\pi e^2}{k_0^2\zeta^2}\Pi^0\left(k_0\zeta,\frac{k_0^2x\zeta}{m}\right)\right]^2 \qquad (3.6.33)$$

(3.6.32)式中完成对 ζ 的积分后得到

$$\int_0^{\zeta_0}\zeta^3\mathrm{d}\zeta\left\{\ln\left[1+\frac{Ae^2}{\zeta^2}\right]-\frac{Ae^2}{\zeta^2}\right\}$$

$$=\frac{1}{4}A^2e^2\left\{\frac{\zeta_0^4}{A^2e^4}\left[\ln\left(1+\frac{Ae^2}{\zeta_0^2}\right)-\frac{Ae^2}{\zeta_0^2}\right]-\ln\left(1+\frac{\zeta_0^2}{Ae^2}\right)\right\}$$

$$\approx\frac{1}{4}A^2e^2\left[\ln(Ae^2)-\frac{1}{2}-2\ln\zeta_0\right]+O(e^6) \qquad (3.6.34)$$

其中

$$A(x)=\frac{4mR(x)}{k_0\pi}=\frac{4m}{k_0\pi}\left(1-x\arctan\frac{1}{x}\right) \qquad (3.6.35)$$

(3.6.34)式表现了Ω_r 的非解析行为. 虽然对任何 $\zeta_0>0$，定积分

是有限的，但微扰级数的每一项都是发散的：

$$\int_0^{\zeta_0}\zeta^3\mathrm{d}\zeta\left\{\ln\left[1+\frac{Ae^2}{\zeta^2}\right]-\frac{Ae^2}{\zeta^2}\right\}$$

$$=-\frac{1}{2}A^2e^4\int_0^{\zeta_0}\frac{\mathrm{d}\zeta}{\zeta}+\frac{1}{3}A^3e^6\int_0^{\zeta_0}\frac{\mathrm{d}\zeta}{\zeta^3}+\cdots \tag{3.6.36}$$

因为 $\zeta\to0$ 时 $\Pi^0(k_0\zeta,k_0x\zeta/m)$ 趋于常数值，所以 $\zeta_0\to0$ 时 Ω_{r2} 也表现出对数发散. 由(3.6.27)式很容易证明，它的发散与(3.6.34)式的发散是相同的. 而下面的量

$$I(x)\equiv-\frac{6}{\pi^3}\lim_{\zeta_0\to0}\left\{R^2(x)\ln\zeta_0\right.$$

$$\left.+\left(\frac{\pi^2}{mk_0}\right)^2\int_{\zeta_0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\zeta}{\zeta}\left[\Pi^0\left(k_0\zeta,\ \frac{k_0^2x\zeta}{m}\right)\right]^2\right\} \tag{3.6.37}$$

是有限的. 由(3.6.31)、(3.6.34)和(3.6.37)式得到

$$\Omega_r\approx\frac{Vk_0^5}{8\pi^3m}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left\{\frac{1}{4}\left[e^2A(x)\right]^2\ln\left[e^2A(x)\right]\right.$$

$$\left.-\frac{1}{8}\left[e^2A(x)\right]^2+\frac{4\pi}{3}\left(\frac{me^2}{k_0}\right)^2I(x)\right\} \tag{3.6.38}$$

这个公式准确到 e^4. 现在的计算已经化简到一维积分.

在计算 Ω_r 之前，将准确到 $e^4\ln e$ 和 e^4 的 Ω_r 的公式整理如下：

$$\Omega(T,V,\mu)=\Omega_0+\Omega_1+\Omega_r+\Omega_{2b}+2\Omega_{2c} \tag{3.6.39}$$

在相同的近似下平均粒子数为

$$N(T,V,\mu)=-\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{TV}=-\frac{\partial\Omega_0}{\partial\mu}$$

$$-\frac{\partial\Omega_1}{\partial\mu}-\frac{\partial(\Omega_r+\Omega_{2b}+2\Omega_{2c})}{\partial\mu} \tag{3.6.40}$$

它表示 N 与 μ 的函数关系. (3.6.39)式、(3.6.40)式可以准确地描写简并电子气. 注意到以上方程中的 μ 是有相互作用时电子气的化学势，因而是耦合常数 e^2 的函数. 将 μ 展开为 e^2 的幂级数

$$\mu=\mu_0+\mu_1+\mu_2+\cdots \tag{3.6.41}$$

角标表示对 e^2 的阶级. 将(3.6.40) 式的每一项在 $\mu=\mu_0$ 附近展开成Taylor级数. 由第一项和第二项得到

$$N=-\left(\frac{\partial\Omega_0}{\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_0} \tag{3.6.42}$$

$$\mu_1=-\frac{(\partial\Omega_1/\partial\mu)_{\mu=\mu_0}}{(\partial^2\Omega_0/\partial\mu_2)_{\mu=\mu_0}} \tag{3.6.43}$$

(3.6.42)式决定 μ_0 与N的关系, (3.6.43) 式决定 μ_1 与 μ_0 的关系. μ_0 是温度T下密度为 N/V 时理想费密气体的化学势.

由变量μ变到变量N相应的热力学函数变为自由能

$$F(T,V,N)=E-TS=\Omega+\mu N$$

F 也可以在形式上展开为 e^2 的幂级数

$$\begin{aligned}F=&\Omega_0(\mu_0)+(\mu_1+\mu_2)\left(\frac{\partial\Omega_0}{\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_0}+\frac{1}{2}\mu_1^2\left(\frac{\partial^2\Omega_0}{\partial\mu^2}\right)_{\mu=\mu_0}\\&+\Omega_1(\mu_0)+\mu_1\left(\frac{\partial\Omega_1}{\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_0}+\Omega_{\rm r}(\mu_0)+\Omega_{2\rm b}(\mu_0)\\&+2\Omega_{2\rm c}(\mu_0)+\mu_0N+(\mu_1+\mu_2)N\end{aligned} \tag{3.6.44}$$

根据(3.6.42)式,(3.6.44)式中第二项与最后一项互相抵消,因而并不出现对 μ_2 的依赖性. 由(3.6.43)式、(3.6.44)式可以得到

$$\begin{aligned}F(T,V,N)=&F_0(T,V,N)+\Omega_1(\mu_0)+\Omega_{\rm r}(\mu_0)+\Omega_{2\rm b}(\mu_0)\\&+\left[2\Omega_{2\rm c}-\frac{1}{2}\ \frac{(\partial\Omega_1/\partial\mu)^2{}_{\mu=\mu_0}}{(\partial^2\Omega/\partial\mu^2)_{\mu=\mu_0}}\right]\end{aligned} \tag{3.6.45}$$

μ_0 是N的函数, $F_0(T,V,N)=\Omega_0(\mu_0)+\mu_0N$ 是理想费密气体的自由能.

绝对零度时以上描述特别简单. 由统计物理我们知道 (下面将 $\hbar$ 明确写出)

$$\Omega_0(0,V,\mu_0)=-\frac{2}{15\pi^2}V\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\ \mu_0^{5/2}$$

$$\left(\frac{\partial\Omega_0(0,V,\mu_0)}{\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_0}=-\frac{1}{3\pi^2}V\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\ \mu_0^{3/2} \tag{3.6.46}$$

$$\left(\frac{\partial^2\Omega_0(0,V,\mu)}{\partial\mu^2}\right)_{\mu=\mu_0}=-\frac{1}{2\pi^2}V\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\mu_0^{1/2}$$

零级项为

$$\mu_0(N)=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2N}{V}\right)^{2/3}\equiv\frac{\hbar^2k_{\mathrm{F}}^2}{2m}=\varepsilon_{\mathrm{F}}^0 \tag{3.6.47}$$

可以证明，(3.6.45) 式的最后一项在 $T=0$ 时等于零. 这样相互作用N粒子系统基态的能量可表示为

$$E=E_0+\Omega_1(\varepsilon_{\mathrm{F}}^0)+\Omega_{\mathrm{r}}(\varepsilon_{\mathrm{F}}^0)+\Omega_{2\mathrm{b}}(\varepsilon_{\mathrm{F}}^0) \tag{3.6.48}$$

因为 $T\to0$ 时 $F=E-TS\to E$. 第一项 E_0 是理想费米气体的基态能量，$E_0=\frac{3}{5}N\varepsilon_{\mathrm{F}}^0$. $\Omega_1(\varepsilon_{\mathrm{F}}^0)$ 是一级交换能

$$\Omega_1(\varepsilon_{\mathrm{F}}^0)=-4\pi e^2V\int\frac{\mathrm{d}^3pd^3q}{(2\pi)^6}\ \frac{1}{|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}|}\times\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{p}|)\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{q}|) \tag{3.6.49}$$

(3.6.48)式中其余的项代表相关能

$$E_{\mathrm{corr}}=\Omega_{\mathrm{r}}(\varepsilon_{\mathrm{F}}^0)+\Omega_{2\mathrm{b}}(\varepsilon_{\mathrm{F}}^0) \tag{3.6.50}$$

相关能的主要项是 Ω_{r} 的长波部分. 用 § 3-1 中引入的无量纲单位并考虑到 $k_0=k_{\mathrm{F}}$, 我们有

$$E_{\mathrm{corr}}=\frac{Ne^2}{2a_0}\varepsilon_{\mathrm{corr}} \tag{3.6.51}$$

由(3.6.35)式、(3.6.38)式得到

$$\varepsilon_{\mathrm{corr}}=\frac{3}{\pi^3}\ln r_s\int_{-\infty}^{\infty}[R(x)]^2\mathrm{d}x\qquad r_s\to0 \tag{3.6.52}$$

考虑到(3.6.29)式, 可以算出此式中的积分

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x[R(x)]^2=\int_0^1\mathrm{d}y\int_0^1\mathrm{d}z\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,\frac{y^2z^2}{(y^2+x^2)(z^2+x^2)}=\pi\int_0^1\mathrm{d}y\int_0^1\mathrm{d}z\frac{yz}{y+z}=\frac{2}{3}\pi(1-\ln2) \tag{3.6.53}$$

这样就得到

$$\varepsilon_{\mathrm{corr}}=\frac{2}{\pi^2}(1-\ln 2)\ln r_s+\text{const},\ r_s\to 0 \qquad (3.6.54)$$

由(3.6.50)式可以得到常数项，但实际计算比较困难. 引入无量纲单位可将(3.6.16)和(3.6.38)式写为

$$\Omega_{2\mathrm{b}}(\varepsilon_{\mathrm{F}}^0)=\frac{Ne^2}{2a_0}\varepsilon_2^b \qquad (3.6.55)$$

$$\Omega_{\mathrm{r}}(\varepsilon_{\mathrm{F}}^0)=\frac{Ne^2}{2a_0}\left\{\frac{3}{\pi^3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x[R(x)]^2\right.$$
$$\left.\times\left[\ln\left(\frac{4\alpha r_s}{\pi}\right)+\ln R(x)-\frac{1}{2}\right]+\delta\right\} \qquad (3.6.56)$$

其中 $\alpha=\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3}$. ε_2^b 是下面的定积分

$$\varepsilon_2^b=\frac{3}{16\pi^5}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{q^2}\int_{|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|>1}\mathrm{d}^3k\int_{|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|>1}\mathrm{d}^3p$$
$$\times\frac{\theta(1-k)\theta(1-p)}{(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}+\boldsymbol{p})^2[\boldsymbol{q}^2+\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{p})]} \qquad (3.6.57)$$

δ 的公式是

$$\delta\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xI(x)=\lim_{\zeta_0\to 0}\left\{-\frac{4}{\pi^2}(1-\ln 2)\ln\zeta_0-\frac{3}{2\pi^4}\int_{\zeta_0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}q}{q}\right.$$
$$\left.\times\iint\frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}^3p\quad\theta(1-|\boldsymbol{k}|)\theta(1-|\boldsymbol{p}|)\theta(|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|-1)\theta(|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|-1)}{q^2+\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k})}\right\} \qquad (3.6.58)$$

δ 不依赖于 r_s. 将 (3.6.53)式、(3.6.55)式、(3.6.56) 式代入(3.6.50)式得到

$$\varepsilon_{\mathrm{corr}}=\frac{2}{\pi^2}(1-\ln 2)\left[\ln\left(\frac{4\alpha r_s}{\pi}\right)+\langle\ln R\rangle_{\mathrm{av}}-\frac{1}{2}\right]+\delta+\varepsilon_2^b \qquad (3.6.59)$$

$\langle\ln R\rangle_{\mathrm{av}}$ 和 δ 的数值计算结果是

$$\langle \ln R\rangle_{\rm av}\equiv\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xR^2\ln R}{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xR^2}=-0.551 \tag{3.6.60}$$

$$\delta=-0.0508 \tag{3.6.61}$$

ε_2^b 含有 9 重积分是由 Onsager 算出来的，

$$\varepsilon_2^b=\frac{1}{3}\ln 2-\frac{3}{3\pi^2}\zeta(3)\approx 0.048 \tag{3.6.62}$$

相关能的最后结果是

$$\varepsilon_{\rm corr}=0.0622\ln r_s-0.094+O(r_s\ln r_s) \tag{3.6.63}$$

最后，我们证明（3.6.45）式的最后一项等于零．Ω_{2c} 可以写为

$$\Omega_{2c}(T,V,\mu)=\frac{1}{2}V\int\frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^9}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})V(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q})\,n_{\boldsymbol{k}}^0n_{\boldsymbol{p}}^0\,\frac{\partial n_{\boldsymbol{q}}^0}{\partial\varepsilon_{\boldsymbol{q}}^0} \tag{3.6.64}$$

(3.6.64)式的推导利用了

$$-\beta n_q^0(1-n_q^0)=\frac{\partial n_q^0}{\partial\varepsilon_q^0}$$

$T\to 0$ 时，因子 $\partial n_q^0/\partial\varepsilon_q^0$ 简化为$-\delta(\mu-\varepsilon_q^0)$，我们有

$$\Omega_{2c}(0,V,\mu_0)=-\frac{1}{2}V\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\delta(\mu_0-\varepsilon_q^0)(f_q)^2 \tag{3.6.65}$$

其中

$$f_q\equiv\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})n_{\boldsymbol{k}}^0\Big|_{\mu=\mu_0,T=0}$$

$$=\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})\theta(\mu_0-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0) \tag{3.6.66}$$

其中已取 $\mu=\mu_0$．用相同的方法可以算出 $(\partial\Omega_1/\partial\mu)_{\mu=\mu_0}$，结果是

$$\left(\frac{\partial\Omega_1}{\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_0} = -V\int\frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^6}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})\left[n_{\boldsymbol{k}}^0\frac{\partial n_{\boldsymbol{q}}^0}{\partial\mu}+n_{\boldsymbol{q}}^0\frac{\partial n_{\boldsymbol{k}}^0}{\partial\mu}\right]_{\mu=\mu_0,T=0}$$

$$= -2V\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\delta(\mu_0-\varepsilon_q^0)f_{\boldsymbol{q}} \tag{3.6.67}$$

经过计算还可得到

$$\left(\frac{\partial^2\Omega_0}{\partial\mu^2}\right)_{\mu=\mu_0} = -2V\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\delta(\mu_0-\varepsilon_q^0) \tag{3.6.68}$$

它与(3.6.46)式最后一个等式是等价的．定义在费密面上的平均值为

$$\langle\cdots\rangle_F=\frac{(2\pi)^{-3}\int d^3q\cdots\delta(\mu_0-\varepsilon_q^0)}{(2\pi)^{-3}\int d^3q\delta(\mu_0-\varepsilon_q^0)} \tag{3.6.69}$$

(3.6.45)式最后一项有以下形式

$$2\Omega_{2c}(\mu_0)-\frac{1}{2}\frac{(\partial\Omega_1/\partial\mu)^2_{\mu=\mu_0}}{(\partial^2\Omega_0/\partial\mu^2)_{\mu=\mu_0}}$$

$$=-V[\langle(f_q-\langle f_q\rangle_F)^2\rangle_F]\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\delta(\mu_0-\varepsilon_q^0)\leqslant 0 \tag{3.6.70}$$

$\langle f_q\rangle_F$是f_q在费密面上的平均值．(3.6.70)式与对$\langle f_q\rangle_F$的平均平方偏差成正比．电子气有球形费密面，所以它的贡献可以忽略．

以上关于相关能的理论是$r_s\to 0$，即高密度近似的结果．对实际金属，$2\leqslant r_s\leqslant 5$，上述理论不能给出准确的结果．Hubbard 和 Singwi 已提了改进的理论．他们考虑了电子气中的短程排斥相关，改进了对极化部分Π的计算．目前电子气的问题仍在研究中．

参考文献

[1] D. Pines, *Elementary Excitation in Solids*, Benjamin, New York, (1963).

[2] M. Gell-Mann, K. A. Brueckner, *Phys. Rev.*, **106** (1957) 364.

[3] J. Hubbard, *Proc, Roy, Soc.* (London) A **243** (1957), 336.
[4] J. J. Quinn, R. A. Ferrell, *Phys. Rev.*, **112** (1958), 812.
[5] K. S. Singwi, A. Sjölander, M. P. Tosi, R. H. land, *Phys. Rev.*, **B1** (1970), 1044.
[6] A. L. Fetter, J. D. *Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems*, MaGraw-Hill, New York, (1971).
[7] G. D. Mahan, *Many- Particle Physics*, Plenum. Press, New York (1981).
[8] S. Doniach, E. H. Sondheimer, *Green's functions for solid State Physicists*, Benjamin, New York, (1974).
[9] 蔡建华等,量子统计的格林函数理论,科学出版社 (1982).
[10] 李正中,固体理论,高等教育出版社 (1985).

第四章　费密液体理论

第三章指出，电子之间的长程库仑作用引起高频等离子体振荡．但这些模的频率很高，对金属的热学性质和输运性质不起重要作用．考虑了这些模之后还需要考虑电子之间的短程相互作用．在一般金属中这种相互作用很强，与电子动能有相同数量级．相互作用费密子系统的一般理论是 Landau 的费密液体理论．Landau 理论最初是对有短程相互作用的中性费密液体提出来的唯象理论．后来推广到荷电费密液体，因而可应用于固体中的电子气．Landau 理论已得到微观理论的证明．

§4.1　费密液体中的元激发

自旋为 1/2 的有相互作用的费密子系统称为费密液体．费密液体低激发态的理论是 Landau 建立的，可以应用于液体 He^3、金属中的电子和核物质等．

Landau 假定费密液体的激发谱可以按照与费密气体相同的原则构成．为此先讨论费密气体的基态和激发态．理想费密气体的本征态是平面波的反对称联合，每个平面波相应于一个粒子，用波矢 $\boldsymbol{k}$ 表征．为了确定整个系统的状态，可以用分布函数 n_k^0 说明哪些平面波是占据的．理想费密气体的基态相应于单粒子动量从零起到某个 k_F 为止的全部量子态都是占据的，而动量更大的态是空的．在动量空间中被占据的态形成半径为 k_F 的球，称为费密球．基态可以用分布函数 n_k^0 表示如图 4-1．k_F 称为费密动量，由下式决定

$$\frac{k_F^3}{3\pi^2}=\frac{N}{V} \tag{4.1.1}$$

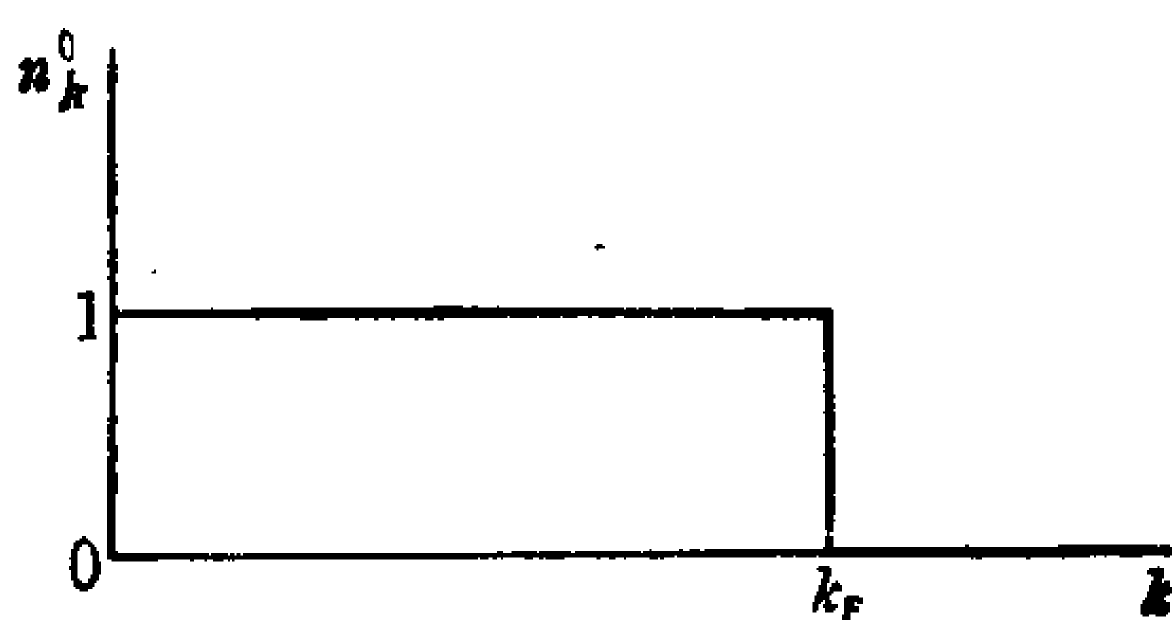


图 4.1

基态能量是每个粒子能量之和

$$E^0=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\frac{k^2}{2m}n^0_{\boldsymbol{k}\sigma}$$

若分布函数变化 $\delta n(\boldsymbol{k}\sigma)$，则总能量的变化是

$$\delta E^0=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\frac{k^2}{2m}\delta n(\boldsymbol{k}\sigma) \tag{4.1.2}$$

我们看到，动量为 $\boldsymbol{k}$ 的粒子的能量 $k^2/2m$ 可以定义为 E^0 的泛函导数 $\delta E^0/\delta n(\boldsymbol{k}\sigma)$. $k>k_F$ 时 δn 是正数，$k<k_F$ 时 δn 是负数.

激发态中粒子的分布函数与基态不同. 逐个将粒子从费密球内移到费密球外即可构成各种激发态. 这样形成的态与基态的差别在于：$k>k_F$ 的态多了一个粒子，$k<k_F$ 的态多了一个“空穴”. 这些 $k>k_F$ 的粒子和 $k<k_F$ 的空穴就是理想费密气体中的元激发. 它们的自旋是 1/2，只能成对的出现和消失. 低激发态中元激发的动量在 k_F 附近.

对于费密液体，由于粒子之间有很强的相互作用，单个粒子的量子态是不存在的，我们只能讨论整个体系的定态. Landau 假定费米液体的基态对应于一个“阶跃”分布函数. 动量绝对值在某一规定范围内的全部量子态都被占满，这个能量区域从 0 一直扩展到某一确定的 k_F，k_F 与液体密度的关系与(4.1.1)式相同，式中 N/V 现在是液体的实际粒子数密度. 费密液体的低激发态与费密气体的低激发态相似，可以用自旋为 1/2、动量在 k_F 附近的元

激发的集合描述．液体的激发也分两类，动量大于 k_F 的粒子和动量小于 k_F 的"空穴"．它们只能成对的出现和消失．这些元激发又称为准粒子，低激发态是准粒子态，可以用准粒子的占据数描述．低激发态的能量只是准粒子态占据数的函数．费密液体与费密气体元激发的差别在于液体内元激发有相互作用．

一、准粒子的能量

若不考虑自旋则每个准粒子有一确定的动量 $\boldsymbol{k}$，可类似理想气体引入准粒子按动量的分布 $n(\boldsymbol{k})$，$n(\boldsymbol{k})$即前三章中的 $n_{\boldsymbol{k}}$，为书写公式方便本章写为 $n(\boldsymbol{k})$。$n(\boldsymbol{k})$应满足归一化条件

$$2\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}n(\boldsymbol{k}) = \frac{N}{V}$$

因子 2 来自自旋简并．$T=0\mathrm{K}$ 时分布函数是阶跃函数

$$n^0(\boldsymbol{k})=\theta(k_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{k}|)$$

因为粒子之间有相互作用，费密液体的总能量E不能写成准粒子能量之和．E 是分布函数 $n(\boldsymbol{k})$的泛函 $E[n(\boldsymbol{k})]$．使 $n(\boldsymbol{k})$ 变化 $\delta n(\boldsymbol{k})$，准确到 $\delta n(\boldsymbol{k})$的二级量，能量的变化是

$$\delta E=\sum_{\sigma}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}\delta n(\boldsymbol{k}\sigma)+\frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'}\int\frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^6}$$
$$\times f(\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma')\delta n(\boldsymbol{k}\sigma)\delta n(\boldsymbol{k}'\sigma') \qquad (4.1.3)$$

f 是Landau 引入的一个新的函数，是两个准粒子相互作用的能量，可看作能量对分布函数的二阶泛函导数．$\delta n(\boldsymbol{k}\sigma)$ 是对基态占据数的偏差，

$$\delta n(\boldsymbol{k}\sigma)=n(\boldsymbol{k}\sigma)-n^0(\boldsymbol{k}\sigma)$$

$n^0(\boldsymbol{k}\sigma)$ 是基态分布函数．准粒子能量 $\varepsilon(\boldsymbol{k}\sigma)$ 定义为总能量E对分布函数的一阶泛函导数．

$$\varepsilon(\boldsymbol{k}\sigma)=\frac{\delta E}{\delta n(\boldsymbol{k}\sigma)}$$

$$=\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0}+\sum_{\sigma'}\int\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}f(\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma')\delta n(\boldsymbol{k}'\sigma') \tag{4.1.4}$$

$\varepsilon(\boldsymbol{k}\sigma)$依赖于其它准粒子的分布. 在绝对零度的平衡态中所有的$\delta n(\boldsymbol{k}\sigma)=0$, 我们有

$$\varepsilon(\boldsymbol{k},\sigma)=\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^{0} \tag{4.1.5}$$

对$k>k_{\mathrm{F}}$, $\varepsilon(\boldsymbol{k}\sigma)$是加进一个动量为$\boldsymbol{k}$的准粒子时系统能量的变化. $k=k_{\mathrm{F}}$时, $\varepsilon(\boldsymbol{k}\sigma)$是在费密面上加一个粒子所需的能量. 在费密面上加一个粒子所得到的态是$N+1$个粒子的基态, 因此有

$$\varepsilon_{\mathrm{F}}=E_0(N+1)-E_0(N)=\mu \tag{4.1.6}$$

$\mu=\partial E_0/\partial N$是化学势, E_0是基态能量.

函数f是费密液体很重要的特征量. 由(4.1.3)式可以看出, $f(\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma')=f(\boldsymbol{k}'\sigma',\boldsymbol{k}\sigma)$. 假定系统不存存磁有序, 也不存在外磁场, 则准粒子能量不依赖于自旋. 两个准粒子的相互作用只依赖于它们自旋的相对取向, 这时可将f写为

$$f(\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma')=\Phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')+\zeta(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\delta_{\sigma,\sigma'} \tag{4.1.7}$$

ζ代表两个自旋平行的准粒子的交换相互作用.

二、准粒子的有效质量

无外磁场时准粒子能量与自旋无关, $\varepsilon^0(\boldsymbol{k})$可在$k_{\mathrm{F}}$附近展开,

$$\varepsilon^0(\boldsymbol{k})\approx\varepsilon^0(k_{\mathrm{F}})+(k-k_{\mathrm{F}})\left.\frac{\partial\varepsilon^0(\boldsymbol{k})}{\partial k}\right|_{k=k_{\mathrm{F}}}$$

$$=\mu(0)+v_{\mathrm{F}}(k-k_{\mathrm{F}}) \tag{4.1.8}$$

由此得到

$$\xi(\boldsymbol{k})=\varepsilon^0(\boldsymbol{k})-\mu(0)=v_{\mathrm{F}}(k-k_{\mathrm{F}}) \tag{4.1.9}$$

$\mu(0)$是$T=0\mathrm{K}$时的化学势. v_{F}是常数, 是费密面上元激发的速

度，它可以写为

$$v_F=\frac{k_F}{m^*} \tag{4.1.10}$$

m^* 是有效质量．系统的性质由 m^* 和 f 描写．Landau 证明，对平移不变系统，m^* 与 f 之间有确定的关系．假定系统整体有一个速度 $\boldsymbol{v}$，在运动系统中粒子间的相互作用是不变的．系统的总动量是

$$\boldsymbol{P}=Nm\boldsymbol{v}$$

m 是自由费密子的质量．动量的变化引起准粒子占据数的变化，这个变化必须与总动量的变化一致，这个要求导致 m^* 和 f 之间的关系．

如果没有外场作用到液体上，那末液体单位体积的动量就等于质量输运的通量，这是伽利略相对性原理的直接结论．让我们把这个简单的事实写成关系式．费密液体单位体积的动量显然等于单位体积内准粒子动量之和，也就是等于

$$2\int \boldsymbol{k}n\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}$$

另一方面，假定液体粒子数和准粒子数相等，则液体粒子的通量也就等于准粒子的通量，即

$$2\int \boldsymbol{v}n\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}$$

$\boldsymbol{v}$ 是准粒子的速度．质量通量由此式乘粒子质量 m 而得到．根据定义 $\boldsymbol{v}=\partial\varepsilon/\partial\boldsymbol{k}$．我们把动量和质量通量相等的条件写为

$$\int \boldsymbol{k}n\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}=m\int\frac{\partial\varepsilon}{\partial\boldsymbol{k}}n\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} \tag{4.1.11}$$

将(4.1.11)式对 n 变分，并注意到能量变化与 n 的关系是(4.1.4)。无磁场时有

$$\delta\varepsilon=\frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'}\int f(\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma')\delta n(\boldsymbol{k}',\sigma')\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}$$

由此得到

$$\int\frac{\boldsymbol{k}}{m}\delta n\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}=\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\ \frac{\partial\varepsilon}{\partial\boldsymbol{k}}\delta n$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'}\int\frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^6}n(\boldsymbol{k}\sigma)\delta n'(\boldsymbol{k}'\sigma')\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}f(\boldsymbol{k}\sigma,\ \boldsymbol{k}'\sigma')$$

在右边第二项中对 $\boldsymbol{k}$ 作分部积分并作变量变换 $\boldsymbol{k}\sigma\rightleftarrows\boldsymbol{k}'\sigma'$，得到

$$\int\frac{\boldsymbol{k}}{m}\delta n\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}=\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\ \frac{\partial\varepsilon}{\partial\boldsymbol{k}}\delta n$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\int\frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^6}\delta nf\ (\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma')\ \frac{\partial n(\boldsymbol{k}'\sigma')}{\partial\boldsymbol{k}'}$$

由于 δn 的任意性，可以得到

$$\frac{\boldsymbol{k}}{m}=\frac{\partial\varepsilon}{\partial\boldsymbol{k}}-\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\int\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}f(k\sigma,\ \boldsymbol{k}'\sigma')\ \frac{\partial n(\boldsymbol{k}'\sigma')}{\partial\boldsymbol{k}'}$$

$T=0\mathrm{K}$ 时能量 ε 在费密面附近可展开为(4.1.8)式，而

$$\frac{\partial n(\boldsymbol{k}',\sigma')}{\partial\boldsymbol{k}'}\approx-\frac{\boldsymbol{k}'}{|\boldsymbol{k}'|}\delta(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}_F)$$

注意到液体是各向同性的，f 只与 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k}'$ 之间的夹角 χ 有关，我们得到

$$\frac{1}{m^*}=\frac{1}{m}-\frac{k_{\mathrm{F}}}{2(2\pi)^3}\sum_{\sigma\sigma'}\int f(\chi)\cos x\mathrm{d}\Omega \qquad (4.1.12)$$

$f(\chi)$是 f 在$|\boldsymbol{k}|=|\boldsymbol{k}'|=k_{\mathrm{F}}$时的值. (4.1.12) 式中对 $\boldsymbol{k}'$ 的方向积分. 这个公式给出了液体粒子质量与准粒子有效质量的关系.

三、费密液体的压缩率

现在计算费密液体的压缩系数，这相当于计算它的声速，因为

声速等于压缩系数的平方根．系统的基态能量 E_0 是粒子数 N 和体积 V 的函数，对宏观体系有

$$E_0=Vf\left(\frac{N}{V}\right) \tag{4.1.13}$$

$N/V=\rho$ 是粒子密度．压力可表示为

$$P=-\frac{\partial E_0}{\partial V} \tag{4.1.14}$$

系统的压缩率定义为

$$\chi=-\frac{1}{V}\ \frac{\partial V}{\partial P}$$

由以上公式可以得到

$$\frac{1}{\chi}=\rho^2 f''(\rho) \tag{4.1.15}$$

由化学势的定义

$$\mu=\frac{\partial E_0}{\partial N}=f'(\rho) \tag{4.1.16}$$

比较(4.1.13)与(4.1.14)式得到

$$\frac{1}{\chi}=N\rho\frac{\partial\mu}{\partial N}\bigg|_V \tag{4.1.17}$$

压缩率的计算归结为计算 $\mathrm{d}\mu/\mathrm{d}N$．

压缩率与低频声的传播直接有关．低频声指声振动的周期比准粒子的碰撞时间大得多．声速 C 由下式给出

$$C^2=\frac{1}{\chi m\rho}=\frac{N}{m}\frac{\partial\mu}{\partial N} \tag{4.1.18}$$

问题在于计算 $\partial\mu/\partial N$．因为 $\mu\approx\varepsilon(k_\mathrm{F})$，所以 k_F 的变化和 $\varepsilon(\boldsymbol{k})$ 本身形状的变化都会引起 μ 的变化，所以有

$$\delta\mu=\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\int\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}f(\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma')\delta n(\boldsymbol{k}'\sigma')+\frac{\partial\varepsilon^0(k_\mathrm{F})}{\partial k_\mathrm{F}}\delta k_\mathrm{F} \tag{4.1.19}$$

由(4.1.1)式得到

$$\delta N=\frac{1}{\pi^2}k_F^2\delta k_F V \tag{4.1.20}$$

(4.1.19)式的积分中重要的仅是 δn 在费密面附近的变化．对动量的绝对值积分后得到

$$\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}f\delta n'=\frac{\delta N}{8\pi V}\int f d\Omega$$

其中 $\delta n'=\delta n(\boldsymbol{k}'\sigma')$

$$\frac{\partial\mu}{\partial N}=\frac{1}{16\pi V}\sum_{\sigma\sigma'}\int f d\Omega+\frac{\pi^2}{k_F m^* V} \tag{4.1.21}$$

利用有效质量的公式(4.1.12)式及(4.1.1)式得到

$$C^2=\frac{k^2{}_F}{3m^2}+\frac{1}{6m}\left(\frac{k_F}{2\pi}\right)^3\sum_{\sigma\sigma'}\int d\Omega f(\chi)(1-\cos\chi) \tag{4.1.22}$$

从这个结果可以看出，(4.1.4)式展开中的第二项在实际问题的讨论中是很重要的．对弱耦合极限 $f\to o$，$m^*\to m$，声速等于 $k_F/(\sqrt{3}\,m)$．

§4.2 准粒子的输运性质，集体模

§4.1节研究了均匀系统．现在考虑系统的非均匀激发态，这时系统的性质随坐标而变．假定非均匀性只出现在宏观尺度上，在微观距离如平均粒子间距的微观尺度上系统仍然是均匀的．因此可以定义局域化分布函数 $\delta n(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})$．它是中心在 $\boldsymbol{r}$ 点的单位体积内的准粒子分布函数的变化(相对于基态分布函数)．为书写方便本小节除特别说明外，$\boldsymbol{k}$ 同时包含自旋坐标．能量是分布函数的泛函，其变分是

$$\delta E=\sum_{k}\int d^3r\varepsilon^0(\boldsymbol{k},r)\delta n(\boldsymbol{k},r)$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{k,k'}\iint d^3r d^3r' f(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r},\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}')\delta n(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})\delta n(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{r}') \quad (4.2.1)$$

上式中取了单位体积. 基态具有平移不变性, $\varepsilon^0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})$不依赖于$\boldsymbol{r}$可写为$\varepsilon^0(\boldsymbol{k})$. 假定$f(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r},\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}')$只依赖于距离$(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$. 对于短程相互作用, 在$f$不等于零的区间内, $\delta n(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})$和$\delta n(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{r}')$实际上是相等的. 因此有

$$\delta E=\sum_{k}\int d^3r\varepsilon^0(\boldsymbol{k})\delta n(\boldsymbol{k},r)$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{k,k'}\int d^3r f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\delta n(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})\delta n(\boldsymbol{k}',r)$$

$$f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')=\int d^3r' f(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r},\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}') \quad (4.2.2)$$

(4.2.2)式第二式中取$f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$与$\boldsymbol{r}$无关,这是一种近似. (4.2.2)式第一式可写为

$$\delta E=\int d^3r\delta E(\boldsymbol{r})$$

$$\delta E(\boldsymbol{n})=\sum_{k}\varepsilon^0(\boldsymbol{k})\delta n(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}) \quad (4.2.3)$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{k,k'}f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\delta n(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})\delta n(\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r})$$

考虑$\boldsymbol{r}$点的准粒子, 它的能量是

$$\varepsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})=\varepsilon^0(\boldsymbol{k})+\sum_{k'}f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\delta n(\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}) \quad (4.2.4)$$

§4-1中我们计算了费密液体中普遍声(或称第一声)的声速, 其振动频率ω和准粒子碰撞时间τ满足$\omega\tau\ll1$. 费密液体中还可以激发另一种声, 相应于$\omega\tau\gg1$, 具有不同于第一声的传播速度,

也不是简单的疏密波. Landau 预言了这种波的存在， 并称之为零声. 按照 ω 与 τ 的关系，通常把第一声称为低频声，零声称为高频声，对低频声，$\tau \ll \frac{1}{\omega}$，可以把波的传播近似看成准静态过程，应用平衡热力学理论计算声速. 对高频声必须从动力学方程出发.

为了研究分布函数 $n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r})$ 随时间的变化，考虑下面的Boltzmann 方程

$$\frac{\partial n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}, t)}{\partial t}+\frac{\partial n}{\partial \boldsymbol{r}} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{k}}-\frac{\partial n}{\partial \boldsymbol{k}} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{r}}=I(n) \tag{4.2.5}$$

$I(n)$是碰撞积分. 偏离平衡不大时分布函数可以写为

$$n=n_{\mathrm{F}}+\delta n$$

n_{F} 是平衡分布函数. δn 是小的修正项，假定它是时间的周期函数

$$\delta n \approx \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}-\omega t)}$$

碰撞积分的数量级是

$$I(n) \approx \frac{\delta n}{\tau}$$

假定$\omega\tau \gg 1$，即讨论高频波段内声的传播. 与$\frac{\partial n}{\partial t}$相比，$I(n)$可以略而不计. 使(4.2.5)式线性化， 注意到 ε 是 n 的泛函数， 所以导数 $\partial \varepsilon / \partial \boldsymbol{r}$ 不等于零：由(4.2.4)式有

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \boldsymbol{r}}=\sum_{\sigma'} \int \frac{\mathrm{d}^3 k'}{(2\pi)^3} f \frac{\partial n'}{\partial \boldsymbol{r}}$$

考虑到这点后我们得到

$$(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{v}-\omega) \delta n-\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{v} \frac{\partial n_{\mathrm{F}}}{\partial \varepsilon} \sum_{\sigma'} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} f \delta n'=0$$

由此方程可以看出，δn 正比于 $\frac{\partial n_{\mathrm{F}}}{\partial \varepsilon} \approx -\delta(\varepsilon-\mu)$. 引入符号 $\delta n = \frac{\partial n_{\mathrm{F}}}{\partial \varepsilon} \nu$， 我们得到

$$(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}-\omega)\nu+\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}\frac{1}{2}\sum_{\sigma'}\int F\nu'\frac{\mathrm{d}\Omega'}{4\pi}=0 \tag{4.2.6}$$

其中

$$F(\chi)=f(\chi)\frac{k_{\mathrm{F}}m^*}{\pi^2} \tag{4.2.7}$$

如果取 $\boldsymbol{k}$ 作极轴并引入 $\tilde{u}=\omega/k$(波的传播速度)，及 $s=\tilde{u}/v$，则(4.2.6)式变为

$$\begin{aligned}&(s-\cos\theta)\nu(\theta,\varphi,\sigma)\\&=\cos\theta\frac{1}{2}\sum_{\sigma'}\int F(\chi)\nu(\theta',\varphi',\sigma')\frac{\mathrm{d}\Omega'}{4\pi}\end{aligned} \tag{4.2.8}$$

这是一个积分方程，它确定波的传播速度(今由 s 表征)和 ν 函数，ν 表征费密面的畸变与角度的关系. 从(4.2.8)式可以看出普通声波和费密液体内 $\omega\tau\gg1$ 所传播的声波的基本差别. 第一种情况下在液体作为整体静止不动的坐标系中分布函数仍然是各向同性的. 第二种情况下分布函数的变化更为复杂，费密面不再是球形，费密面的改变由函数 ν 决定. 这种振荡 Landau 称之为零声.

讨论(4.2.8)式与自旋无关的解. 这时 $F(\chi)$ 中只剩下(4.1.7)式中与自旋无关的部分 $\Phi(\chi)$. 先看最简单的情况，即 $\Phi=\Phi_0=$ 常数. 由方程(4.2.8)式得到

$$\nu=\frac{\mathrm{const}\cdot\cos\theta}{s-\cos\theta}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \tag{4.2.9}$$

我们即将看到，s 应大于 1. 费密面沿运动方向伸长.

将(4.2.9)式代入(4.2.8) 式并令 $F=\Phi_0$，求出 s 的方程式，积分后有

$$\frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1}-1=\frac{1}{\Phi_0} \tag{4.2.10}$$

由此看出，如果 s 是实数(这相当于非衰减波)，则它应该大于

1，即

$$\tilde{u}>v \tag{4.2.11}$$

从方程（4.2.8）式还可看出，这个条件对于任意的 Φ 都是成立的．其次，由于方程式(4.2.10)左面总是正的，所以零声存在的条件就是 Φ_0 大于零．

§4.3 顶角函数和相互作用函数

本节用格林函数方法讨论零声的基本方程．§1.6 节曾经指出，t_1、$t_3>t_2$、t_4 时，$G^{\mathrm{II}}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(x_1x_2;\ x_3x_4)$ 描写粒子－空穴对的传播．零声类型的元激发可以看成是动量接近的准粒子和准空穴的束缚态，顶角函数的极点决定零声元激发量子的能谱．本节先讨论双粒子格林函数和顶角函数的一般性质，然后讨论顶角函数与费密液体中准粒子相互作用函数 f 的关系．

低温下元激发都在费密面附近．下面讨论格林函数在费密面附近的形式．根据 Dyson 方程 G 可写为(略去自旋)

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\Sigma(\boldsymbol{k},\omega)+i\operatorname{sgn}(k-k_{\mathrm{F}})} \tag{4.3.1}$$

Σ是自能，$\varepsilon^0{}_{\boldsymbol{k}}$ 的定义是

$$\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}=\frac{k^2}{2m}-\mu \tag{4.3.2}$$

费密波矢满足下面的方程式

$$\varepsilon^0{}_{\boldsymbol{k}\mathrm{F}}+\Sigma(k_{\mathrm{F}},0)=0 \tag{4.3.3}$$

在$|\boldsymbol{k}|=k_{\mathrm{F}}$，$\omega=0$ 附近将 $\Sigma(\boldsymbol{k},\omega)$展开到$(k-k_{\mathrm{F}})$和$\omega$的一次项有

$$\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+\Sigma(\boldsymbol{k},\omega)=(k-k_{\mathrm{F}})\left[\frac{k_{\mathrm{F}}}{m}+\frac{\partial\Sigma(k_{\mathrm{F}},0)}{\partial k}\right]+\omega\frac{\partial\Sigma(k_{\mathrm{F}},0)}{\partial\omega}+\cdots \tag{4.3.4}$$

由§3·2 的讨论知道，Σ的虚数部分与$(k-k_{\mathrm{F}})$或ω的二次项成

正比．因此上式中的各项都是实数．若略去二次项则有

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{a}{\omega-v_{\mathrm{F}}(k-k_{\mathrm{F}})+\mathrm{isgn}(k-k_{\mathrm{F}})} \tag{4.3.5}$$

其中

$$a=\frac{1}{Z}$$

$$Z=1-\frac{\partial\Sigma(k_{\mathrm{F}},0)}{\partial\omega}$$

$$v_{\mathrm{F}}=\frac{k_{\mathrm{F}}}{m^*}$$

$$\frac{1}{m^*}=\left[\frac{1}{m}+\frac{1}{k_{\mathrm{F}}}\frac{\partial\Sigma(k_{\mathrm{F}},0)}{\partial k}\right]\frac{1}{Z} \tag{4.3.6}$$

v_{F} 是元激发在费密面上的速度，m^*是元激发的有效质量．(4.3.5)式是 $G(\boldsymbol{k},\omega)$ 在极点附近的形式，其一般形式可写为

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{a}{\omega-v_{\mathrm{F}}(k-k_{\mathrm{F}})+\mathrm{isgn}(k-k_{\mathrm{F}})}+G'(\boldsymbol{k},\omega) \tag{4.3.7}$$

G' 是 G 的正规部分．

一、双粒子格林函数和顶角函数

§1-6 中引入了双粒子格林函数．现在将 G^{II} 变换到动量空间．对均匀系统，$G^{\mathrm{II}}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(x_1x_2;x_3x_4)$ 实际上只依赖于三个独立的坐标差，如x_1-x_4, x_2-x_4, x_3-x_4．在动量空间这个性质的结论是，对 $x_1,\cdots x_4$ 的傅氏变换包含一个 δ 函数，即

$$\begin{aligned}&\int G^{\mathrm{II}}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(x_1x_2;x_3x_4)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_1x_1+p_2x_2-p_3x_3-p_4x_4)}\mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\mathrm{d}^4x_3\mathrm{d}^4x_4\\&=(2\pi)^4\delta(p_1+p_2-p_3-p_4)G^{\mathrm{II}}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1p_2;p_3p_4)\end{aligned} \tag{4.3.8}$$

这是因为

$$\begin{aligned}&p_1x_1+p_2x_2-p_3x_3-p_4x_4\\&\quad=p_1(x_1-x_4)+p_2(x_2-x_4)-p_3(x_3-x_4)\\&\qquad-(p_4+p_3-p_1-p_2)x_4\end{aligned}$$

将空间积分变换为对(x_1-x_4)、(x_2-x_4)、(x_3-x_4)及x_4的积分即可证明(4.3.8)式，其逆变换是

$$G^{\text{II}}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(x_1x_2;x_3x_4)=\int\frac{\mathrm{d}^4p_1\mathrm{d}^4p_2\mathrm{d}^4p_3}{(2\pi)^{12}}G^{\text{II}}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$$

$$(p_1,p_2;p_3,p_1+p_2-p_3)\times\exp\{-\mathrm{i}[p_1(x_1-x_4)+p_2(x_2-x_4)-p_3(x_3-x_4)]\}\qquad(4.3.9)$$

方程(1.6.33)式在动量空间的形式是

$$G^{\text{II}}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2;p_3,p_1+p_2-p_3)=G_{\alpha\gamma}(p_1)G_{\beta\delta}(p_2)\delta(p_1-p_3)(2\pi)^4-G_{\alpha\delta}(p_1)G_{\beta\gamma}(p_2)\delta(p_2-p_3)(2\pi)^4+iG_{\alpha\gamma_1}(p_1)G_{\beta\gamma_2}(p_2)G_{\gamma_3\gamma}(p_3)G_{\gamma_4\beta}(p_1+p_2-p_3)\Gamma_{\gamma_1\gamma_2;\gamma_3\gamma_4}(p_1,p_2;p_3,p_1+p_2-p_3)\qquad(4.3.10)$$

根据定义，G^{II}对 x_1、x_2 的交换及 x_3、x_4 的交换是反对称的，顶角函数也有相同的对称性质，即

$$\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2;p_3,p_4)=-\Gamma_{\beta\alpha,\gamma\delta}(p_2p_1;p_3p_4)=-\Gamma_{\alpha\beta,\delta\gamma}(p_1,p_2;p_4,p_3)\qquad(4.3.11)$$

一级顶角修正包括以下的图，其解析式是(4.3.12)式

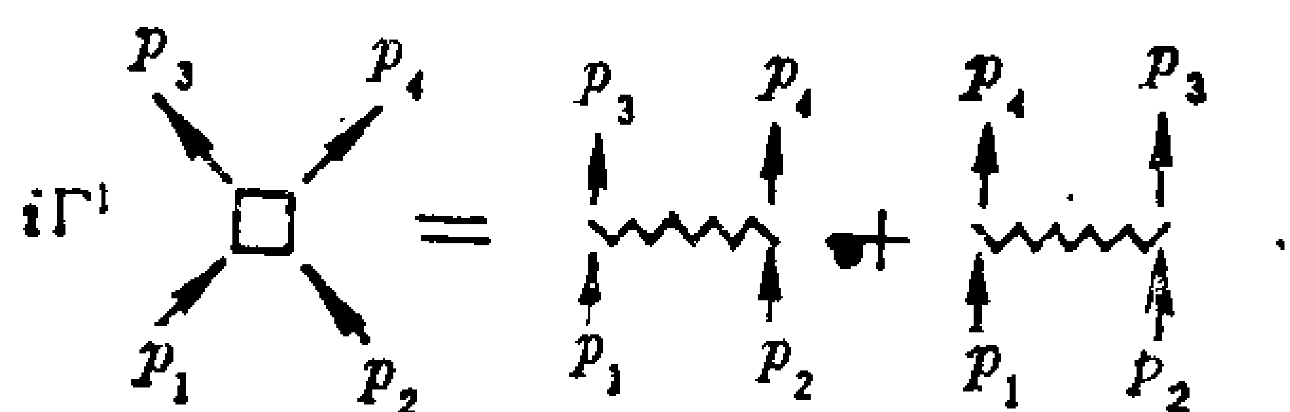


图 4.2

$$\Gamma^1_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2;p_3,p_4)=-\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}V(p_3-p_1)+\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}V(p_4-p_1)\qquad(4.3.12)$$

二级顶角修正如图 4.3. 图 4.2 和图 4.3 表示两个准粒子的散射. 用类似的方法可以讨论一个准粒子和一个准空穴的散射. 图中空心方框表示顶角. 高级项中包括的图 4.4. 其中带箭头的粗线代表重整化后的传播函数 G，顶角函数之间有两个独立传播

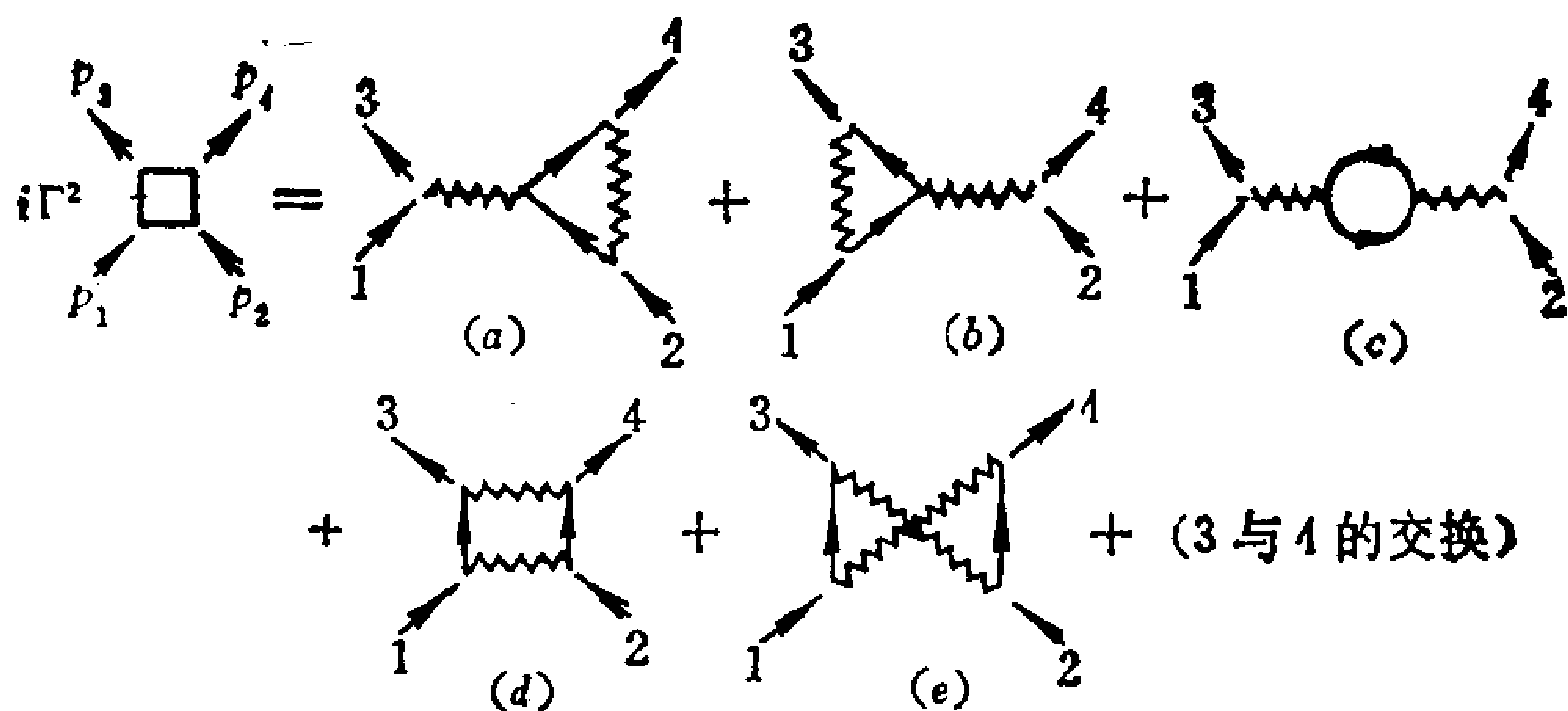


图 4.3

的粒子. 现在引入不可约顶角的定义，将不能分解为图 4.4 那样的图称为不可约顶角. 图 4.3 中 d 是可约顶角，a、b、c、e 等都是不可约顶角. 用 Γ^* 表示所有不可约顶角之和，仍用空心方框表

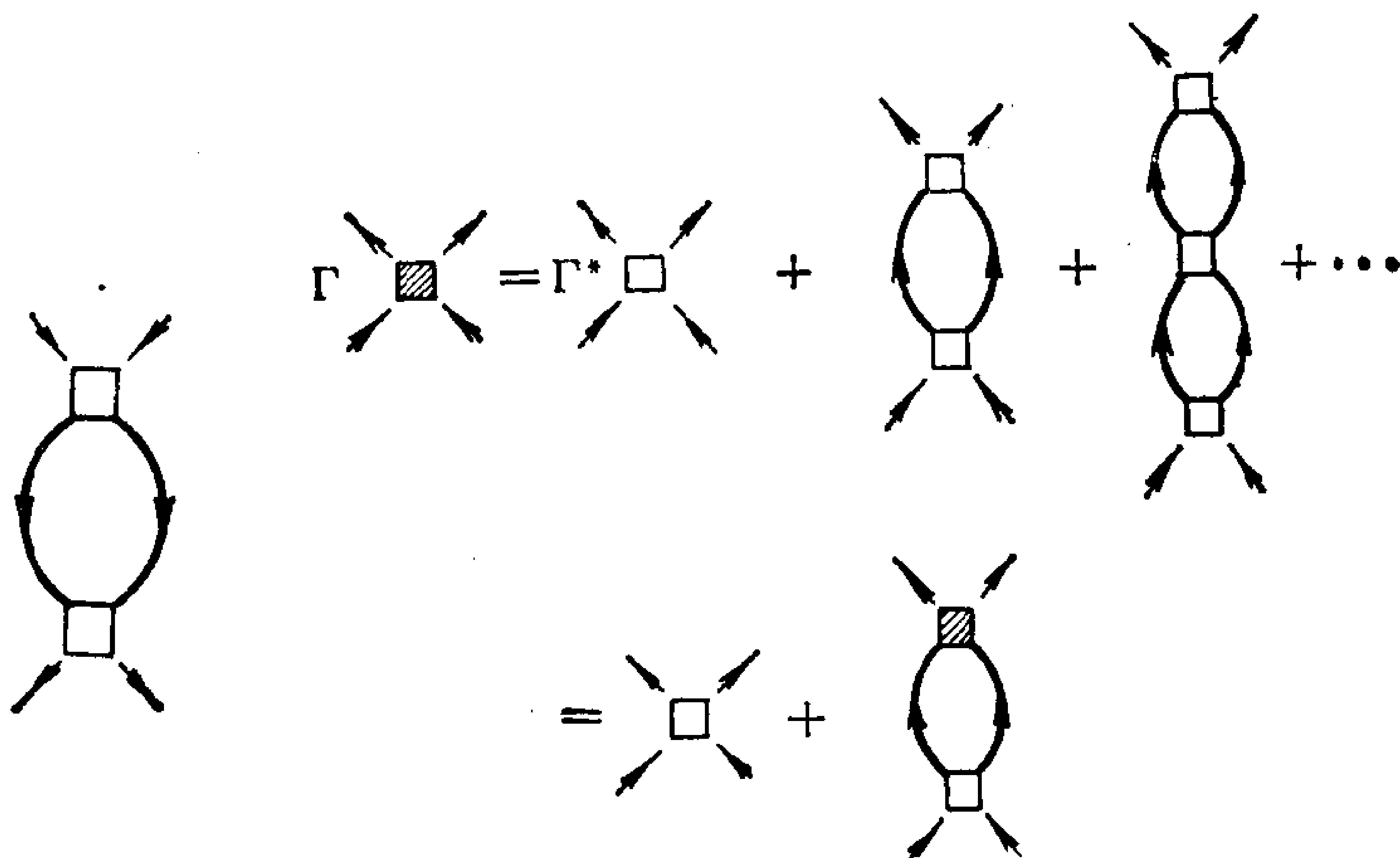


图 4.4

图 4.5

示. 为了得到准确的顶角，我们应该无限重复图 4.4 的过程如图 4.5 所示，其中每个空心方框都代表顶角 Γ^*.

格林函数的图可以表示为图 4.6 对粒子和空穴的散射可作类似的分析.

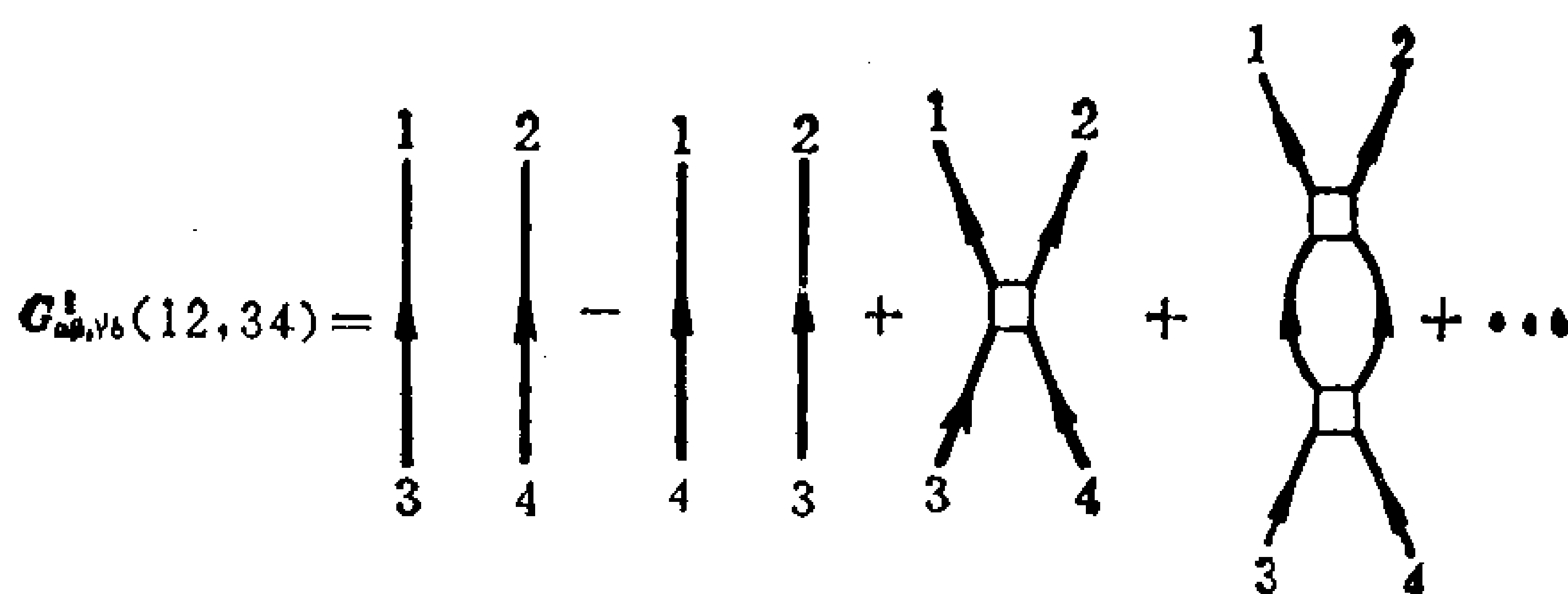


图 4.6

二、动量传递很小时顶角函数的性质

现在研究费密液体中准粒子和准空穴的多重散射. 在多体问题中集体模及激子等与粒子-空穴束缚态有关,外场对系统的作用也会产生粒子-空穴激发对. 因此粒子-空穴多重散射对正常态是很重要的问题.而粒子-粒子多重散射则与超导态有关.描写粒子-空穴对的双粒子格林函数与图4-6有相似的图形,其中相应于独立传播的部分与电子-空穴束缚态及外场激发的电子-空穴对无关,所以下面只讨论顶角部分的性质.

假定粒子之间的作用是短程相互作用. 考虑p_1接近p_3、p_2接近p_4时顶角部分的行为.由于$p_1+p_2=p_3+p_4$,令$p_3=p_1+k$,$p_4=p_2-k$将顶角函数写为

$$\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1, p_2; p_1+k, p_2-k)\equiv\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1, p_2, k_3) \qquad (4.3.13)$$

其中能量、动量传递$k=(\boldsymbol{k},\omega)$是很小的四维矢量($|\boldsymbol{k}|\ll k_{\mathrm{F}}, \omega\ll\mu$). Γ的费曼图中包括图4.7一类图形. q是四维动量$q=(\boldsymbol{q},\varepsilon)$, 图4-7要对$q$积分. $k\to0$时两个格林函数的极点彼此接近, 因而使Γ具有奇异性.

为了计算Γ需要对整个微扰论级数求和. 以$\Gamma^{(1)}$记一切可能的不包括“奇异元素”$G(q)G(q+k)$的图形的总和. 不难看出,对图 4.8 所示的“阶梯”求和就可得到完全的Γ.其中顶角是$\Gamma^{(1)}$,

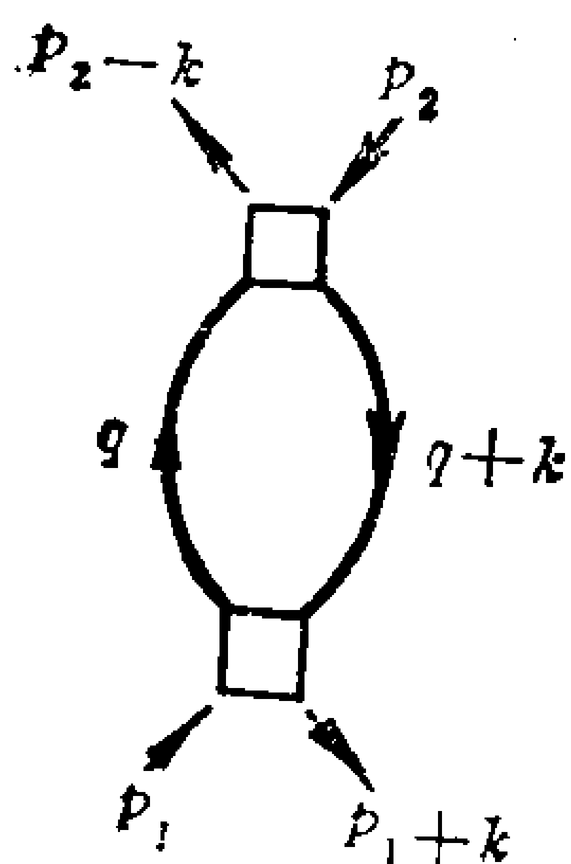


图 4.7

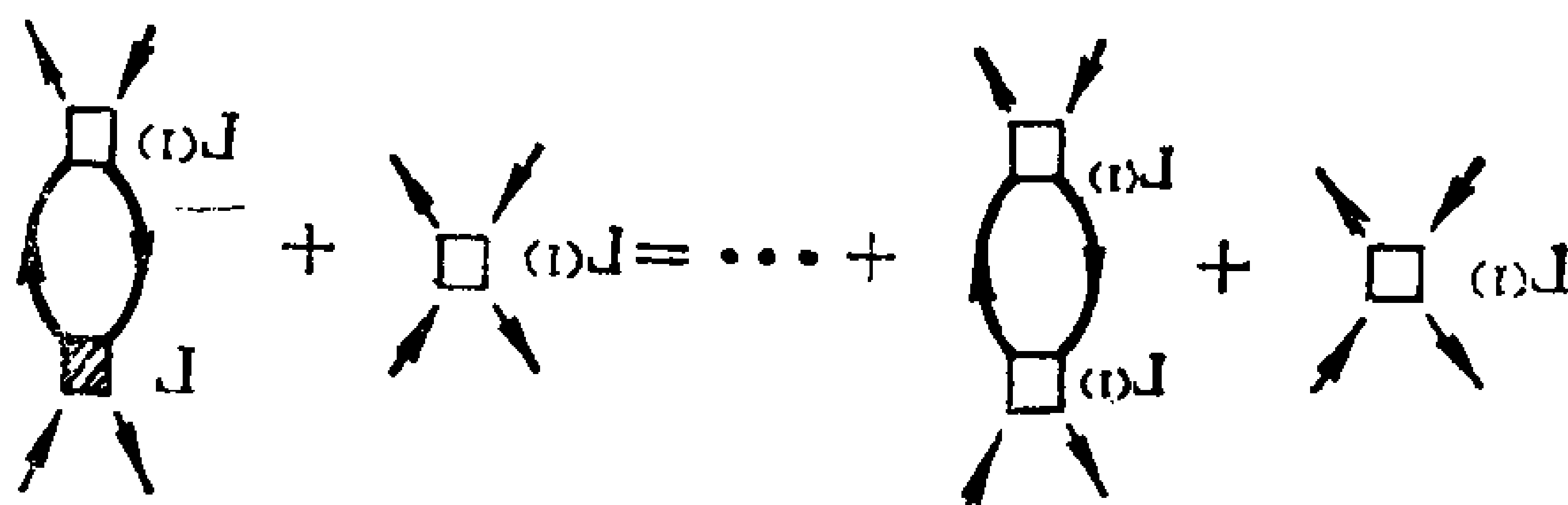


图 4.8

而所有的线都是奇异的. 这种求和可用积分方程表示为

$$\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2,k)=\Gamma^{(1)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2)$$
$$-\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}\Gamma^{(1)}{}_{\alpha\xi,\gamma\eta}(p_1,q)G(q)$$
$$\times G(q+k)\Gamma_{\eta\beta,\xi\delta}(q,p_2,k) \qquad (4.3.14)$$

由于 $k=0$ 时函数 $\Gamma^{(1)}$ 没有奇异性(短程作用力), 我们已令其中的 $k=0$. (4.3.14)式中已取 $G_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}G$.

现在讨论(4.3.14)式中的积分. 它由两项组成, 一项来自距 $\varepsilon=0$、$|\boldsymbol{q}|=k_{\mathrm{F}}$ 点很远的区域, 另一项是在此点邻域的积分,后一项决定整个表达式的奇异性. 如果 k 很小, 这个区域也可以取得很小. 在相应的积分中只有在 G 函数极点邻域的积分才是重要的. 由于两个 G 的变量接近, 可以认为积分号下其它量随 q 缓慢变化. 仅当 $G(q)$ 和 $G(q+k)$ 的极点处于实轴不同侧时, 积分才不等于零. 为此必须 $|q|<k_{\mathrm{F}}$, $|\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}|>k_{\mathrm{F}}$, 或相反. 注意 k 很小, 不难看出, 这时 $|\boldsymbol{q}|\approx k_{\mathrm{F}}$ 而 $\varepsilon=0$. 因此对 q 的积分中, 在原点附近, 乘积 $G(q)G(q+k)$ 可换成 $A\delta(\varepsilon)\delta(|\boldsymbol{q}|-k_{\mathrm{F}})$. 对 ε 和 $\boldsymbol{q}$ 积分 $G(q)G(q+k)$ 即可定出系数 A, 它等于

$$\frac{2\pi\mathrm{i}a^2}{v_{\mathrm{F}}}\cdot\frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}_{\mathrm{F}}}{\omega-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}_{\mathrm{F}}}$$

其中 $\boldsymbol{v}_F$ 是绝对值为 v_F、方向为 $\boldsymbol{q}$ 的矢量. 乘积 $G(q)G(q+k)$ 可写为

$$G(q)G(q+k)=\frac{2\pi \mathrm{i} a^2}{v_F}\cdot\frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}_F}{\omega-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}_F}\delta(\varepsilon)\times\delta(|\boldsymbol{q}|-k_F)+\varphi(q) \tag{4.3.15}$$

其中 $\varphi(q)$ 代表乘积 $G(q)G(q+k)$ 的正规部分. 它只在远区域的积分中重要(因而已令其中的 $k=0$).

(4.3.15)式的第一项有特殊的性质, $\omega\to0$、$\boldsymbol{k}\to0$时它的极限与比 $\omega/|\boldsymbol{k}|$ 的极限有关. 方程 (4.3.14) 的解也是这样, $k\to0$ 时 $\Gamma(p_1,p_2,k)$的性质与ω、和 $\boldsymbol{k}$ 趋于零的方式有关. 先讨论 $\omega\to0$, $\frac{|\boldsymbol{k}|}{\omega}\to0$ 时 Γ 的极限. 这个极限记为 Γ^{ω}. 这时 (4.3.15)第一项趋于零, 因此得到

$$\Gamma^{\omega}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2)=\Gamma^{(1)}{}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2)-\mathrm{i}\int\Gamma^{(1)}{}_{\alpha\xi,\gamma\eta}(p,q)\varphi(q)\Gamma^{\omega}{}_{\eta\beta,\xi\delta}(q,p_2)\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4} \tag{4.3.16}$$

从(4.3.14)式和(4.6.16)式两个方程可消去 $\Gamma^{(1)}$. 为此我们将这些方程写成算符形式,乘积应理解为积分.

$$\begin{aligned}\Gamma^{\omega}&=\Gamma^{(1)}-\mathrm{i}\Gamma^{(1)}\varphi\Gamma^{\omega}\\ \Gamma&=\Gamma^{(1)}-\mathrm{i}\Gamma^{(1)}(\mathrm{i}\Phi+\varphi)\Gamma\end{aligned} \tag{4.3.17}$$

这里 $\mathrm{i}\Phi$ 代表(4.3.15)式的第一项. 由第一个方程得到

$$\Gamma^{\omega}=(1+\mathrm{i}\Gamma^{(1)}\varphi)^{-1}\Gamma^{(1)}$$

在(4.3.17)式第二式中将含有 φ 的项移到左边, 并以算符$(1+\mathrm{i}\Gamma^{(1)}\varphi)^{-1}$ 作用之, 得到

$$\Gamma=\Gamma^{\omega}+\Gamma^{\omega}\Phi\Gamma$$

将此方程式详细写出就是

$$\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2,k)=\Gamma^{\omega}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2)+\frac{a^2k_F^2}{(2\pi)^3v_F}\int\Gamma^{\omega}_{\alpha\xi,\gamma\eta}(p_1,q)\Gamma_{\eta\beta,\xi\delta}(q,p_2,k)\frac{\boldsymbol{v}_F\cdot\boldsymbol{k}}{\omega-\boldsymbol{v}_F\cdot\boldsymbol{k}}\mathrm{d}\Omega \tag{4.3.18}$$

现在取另一极限，即$|\boldsymbol{k}|\to 0$、$\frac{\omega}{|\boldsymbol{k}|}\to 0$. 这个量我们记为$\Gamma^k$. 从方程(4.3.18)求出$\Gamma^k$与$\Gamma^\omega$的关系.

$$\Gamma^k_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2)=\Gamma^\omega_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2)-\frac{a^2k_{\rm F}^2}{(2\pi)^3v_{\rm F}}\int\Gamma^\omega_{\alpha\beta,\gamma\eta}(p_1,q)\Gamma^k_{\alpha\beta,\zeta\delta}(q,p_2)\mathrm{d}\Omega \tag{4.3.19}$$

这个方程表示顶角函数两种极限形式之间的关系.

三、顶角函数和相互作用函数

§1-3讨论了单粒子格林函数G的谱表示. (1.3.52)式第一项分子中的中间态$|\Psi_n\rangle$包含$N+1$个粒子，分母是$\omega-(E_n-E)+\mathrm{i}\delta$，$G$的极点$\omega=E_n-E-\mathrm{i}\delta$正是激发态相对于基态的能量，$|\Psi_n\rangle$包含$N-1$个粒子时也有类似的情况. $G^{\rm II}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(p_1,p_2;\ p_1+k,p_2-k)$有4个$\Psi$算符，谱表示比较复杂，但如(1.3.52)式那样也有几项，各项分子中的中间态可以包含N、$N\pm1$、$N\pm2$个粒子等，分母是几个因子的乘积，不象G的谱表示那样各项分母中只包含一个因子如$[\omega-(E_n-E)+\mathrm{i}\delta]$等. 若分子的中间态中包含粒子-空穴束缚态$|\Psi_{s\lambda}\rangle$，则该项的分母中包含因子$[\omega-(E_{s\lambda}-E)+\mathrm{i}\delta]$，$s$、$\lambda$可以看作是束缚态的量子数. $|\Psi_{s\lambda}\rangle$是N粒子态. $G^{\rm II}$谱表示中与$N\pm1$粒子中间态相应的极点与G的极点是一致的，这些G就是(4.3.10)式中的单粒子格林函数. (4.3.10)式中顶角函数的极点对应于N或$N\pm2$粒子中间态，这些中间态与基态角动量的差是0或1，相应于这些极点的元激发有整数自旋(0或1)，服从玻色统计. 因此顶角函数的极点决定费密液体能谱的玻色分支.

粒子数没有变化的中间态(即N粒子态)的极点相应于零声量子的元激发. (4.3.15)式的推导中曾指出，$|\boldsymbol{q}|$和$|\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}|$中必

须有一个大于 k_F 而另一个小于 k_F. 由基态产生激发态时粒子在费密球的外面,空穴在费密球内部,在这个意义上可以说费密液体中的零声激发可以看作粒子-空穴束缚态.

Γ 的极点中相应于 $N\pm2$ 粒子中间态的元激发可以看作是两个粒子或两个空穴的束缚态,这种束缚态的出现将导致费密液体的超流,在超导理论中起重要作用.

因此,为了决定正常费密液体能谱的玻色分支,需要研究顶角函数 $\Gamma(p_1,p_2,k)$ 对变量 $k=(\boldsymbol{k},\omega)$ 的极点. 对低激发态,ω 和 $\boldsymbol{k}$ 都比较小,因此可以利用对小的 k 值推导出的 $\Gamma(p_1,p_2,k)$ 的方程.

由于在极点邻域 $\Gamma(p_1,p_2,k)\gg\Gamma^\omega(p_1,p_2)$, 可略去(4.3.18)式右端的 Γ^ω. 注意到变量 p_2 以及角标 β 和 δ 在方程中起参数的作用. 因此在极点附近函数 Γ 可以表示成两个函数的乘积 $\chi_{\alpha\gamma}(p_1,k)\chi'_{\beta\delta}(p_2,k)$. 消去方程(4.3.18)式两端的 $\chi'_{\beta\delta}$, 引入记号

$$\nu_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{n})=\frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k}}{\omega-v_F(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k})}\chi(p_1,k)$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 是沿 $\boldsymbol{p}_1$ 方向的单位矢量. 这样就得到 $\nu_{\alpha\gamma}$ 的方程式

$$(\omega-v_F\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k})\nu_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{n})=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k}\frac{a^2k_F^2}{(2\pi)^3}\int\Gamma^\omega_{\alpha\xi,\gamma\eta}(\boldsymbol{n},\boldsymbol{l})\nu_{\eta\xi}(\boldsymbol{l})\mathrm{d}\Omega \tag{4.3.20}$$

这个方程与描写零声的方程(4.2.6)式的形式一致. 比较这两个方程可以得到 $f(\boldsymbol{k}\sigma,\ \boldsymbol{k}'\sigma')$ 与 Γ^ω 的关系

$$f_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{n},\boldsymbol{l})=a\Gamma^\omega_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{n},\boldsymbol{l}) \tag{4.3.21}$$

这是 f 与准粒子散射的关系. $a^2\Gamma^\omega$ 起着费密液体理论中 f 函数的作用.

§4.4 高密度电子气中的相互作用函数

§4.3 节讨论了有短程相互作用的中性费密液体的顶角函数和 f 函数的关系. 短程相互作用的势当 $|\boldsymbol{q}|\to0$ 时取有限值. 电

子之间的库仑势是长程势，$V(q)=\dfrac{4\pi e^2}{q^2}$，$q\to 0$ 时是发散的. Landau 理论也可以推广到有长程相互作用的多电子系统. 由于篇幅限制本节只讨论RPA近似下电子气的相互作用函数$f(\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma')$.

根据定义

$$f(\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k}'\sigma')=\frac{\delta\varepsilon(\boldsymbol{k}\sigma)}{\delta n(\boldsymbol{k}'\sigma')}=\frac{\delta^2 E}{\delta n(\boldsymbol{k}\sigma)\delta n(\boldsymbol{k}'\sigma')} \qquad (4.4.1)$$

准粒子能量可以写为

$$\varepsilon(\boldsymbol{k}\sigma)=\varepsilon^0(\boldsymbol{k})+\Sigma_\sigma(\boldsymbol{k},\varepsilon(\boldsymbol{k})) \qquad (4.4.2)$$

Σ 是自能. 环图近似下 Σ 可写为

$$\Sigma_\sigma(\boldsymbol{k},\varepsilon)=\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^3pd\omega}{(2\pi)^4}\frac{V(\boldsymbol{q})}{\kappa_r(\boldsymbol{p},\omega)}G^0{}_\sigma(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p},\varepsilon-\omega) \qquad (4.4.3)$$

格林函数 G^0 可以表示为

$$G^0_\sigma(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{n^0(\boldsymbol{k}\sigma)}{\omega-\varepsilon^0(\boldsymbol{k})-\mathrm{i}\delta}+\frac{1-n^0(\boldsymbol{k}\sigma)}{\omega-\varepsilon^0(\boldsymbol{k})+\mathrm{i}\delta} \qquad (4.4.4)$$

现在考虑(4.4.3)式的变分导数. 假定 $f_{\sigma'}(\boldsymbol{k},\omega)$ 是一个任意函数，与分布函数无关. 我们计算下式

$$\begin{aligned}
&\frac{\delta}{\delta n(\boldsymbol{p},\sigma)}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma'}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{i}G^0_{\sigma'}(\boldsymbol{k},\omega)f_{\sigma'}(\boldsymbol{k},\omega)\\
&=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma'}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{i}\left[\frac{1}{\omega-\varepsilon^0(\boldsymbol{k})-\mathrm{i}\delta}\right.\\
&\qquad\left.-\frac{1}{\omega-\varepsilon^0(\boldsymbol{k})+\mathrm{i}\delta}\right]\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}}\delta_{\sigma,\sigma'}f_{\sigma'}(\boldsymbol{k},\omega)\\
&=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma'}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}i[2\pi\mathrm{i}\delta(\omega-\varepsilon^0(\boldsymbol{k}))]\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}}\delta_{\sigma,\sigma'}f_{\sigma'}(\boldsymbol{k},\omega)\\
&=-f_\sigma(\boldsymbol{p},\varepsilon^0(\boldsymbol{p}))
\end{aligned} \qquad (4.4.5)$$

将此结果应用于(4.4.3)式并考虑到介电常数与分布函数的关系，我们有

$$f(\boldsymbol{k}\sigma, \boldsymbol{q}\sigma') = \frac{\delta\Sigma_\sigma(\boldsymbol{k}, \varepsilon(\boldsymbol{k}))}{\delta n(\boldsymbol{q}, \sigma')} = -\frac{V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})}{\kappa_r(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}, \varepsilon(\boldsymbol{k})-\varepsilon(\boldsymbol{q}))}\delta_{\sigma,\sigma'}$$

$$-\sum_{\boldsymbol{p}}\int\frac{d\omega}{2\pi}\frac{V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})}{\kappa_r^2(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}, \varepsilon(\boldsymbol{k})-\omega)}\mathrm{i}G^0(\boldsymbol{p}, \omega)\ \frac{\delta\kappa_r(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}, \varepsilon(\boldsymbol{k})-\omega)}{\delta n(\boldsymbol{q}, \sigma')} \tag{4. 4. 6}$$

已将(4. 4. 3)式中对 $\boldsymbol{p}$ 的积分改为求和，并取单位体积. 我们讨论费密面附近的相互作用函数，因此有 $\varepsilon(\boldsymbol{k})=\varepsilon(\boldsymbol{p})=\mu$. 同时利用(4. 1. 7)式将 f 分为直接相互作用和交换相互作用两部分

$$f(\boldsymbol{k}\sigma, \boldsymbol{q}\sigma') = \Phi(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}) + \zeta(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q})\delta_{\sigma,\sigma'} \tag{4. 4. 7}$$

与(4. 4. 6)式比较可以看出，交换部分

$$\zeta(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}) = -\frac{V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})}{\kappa_r(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}, 0)} \tag{4. 4. 8}$$

这是屏蔽了的库仑势. 直接相互作用部分比较复杂. κ_r 可写为

$$\kappa_r(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}, \varepsilon(\boldsymbol{k})-\omega) = 1-\mathrm{i}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})\ \sum_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\int\frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}\mathrm{i}\ G^0_{\sigma'}(\boldsymbol{k}'\omega')$$

$$\times[\mathrm{i}G^0_{\sigma'}(\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}, \omega'+\varepsilon(\boldsymbol{k})-\omega)] \tag{4. 4. 9}$$

由(4. 4. 5)式可得到它的变分为

$$\frac{\delta\kappa_r(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}, \varepsilon(\boldsymbol{k})-\omega)}{\delta n(\boldsymbol{q}, \sigma)}$$

$$= -V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})[G^0_\sigma(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}, \varepsilon(\boldsymbol{q})+\varepsilon(\boldsymbol{k})-\omega)$$

$$+G^0_\sigma(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k}, \varepsilon(\boldsymbol{q})-\varepsilon(\boldsymbol{k})+\omega)] \tag{4. 4. 10}$$

代入(4. 4. 6)式得到

$$\Phi(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{p}}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{V^2(\boldsymbol{q})}{\kappa_r^2(\boldsymbol{p}, \omega)}\mathrm{i}G^0_{\sigma'}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}, \varepsilon(\boldsymbol{k})-\omega)$$

$$\times[G^0_\sigma(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}, \varepsilon(\boldsymbol{q})+\omega)$$

$$+G^0_\sigma(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}, \varepsilon(\boldsymbol{q})-\omega)] \tag{4. 4. 11}$$

这样我们在环图近似下算出了相互作用函数 f. 用 f 可以计算有

效质量、压缩率、磁化率等物理量.

参考文献

[1] L. Landau, *Sov. Phys.*, *JEPT*. **3** (1957), 920.

[2] L. Landau, *Sov. Phys.*, *JEPT*. **5** (1957), 101.

[3] L. Landau, *Sov. Phys.*, *JEPT*. **8** (1959), 70.

[4] A. A. 阿布里科索夫, Л. П. 戈尔可夫, И. Е. 加洛辛斯基, 统计物理学中的量子场论方法, 科学出版社, (1963).

[5] P. Noziéres, *Theory of Interacting Fermi Systems*, Benjamin, New York, (1964).

[6] E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, *Statistical Physics Part 2*. Pergamon Press, Oxford, (1980).

第五章　电子-声子相互作用

电子-声子相互作用与金属的许多性质有关. 电子受声子的散射是金属电阻的重要原因. 电子吸收声子引起声衰减. 电子-声子相互作用使电子能量和声子频率发生变化. 电子比热容也受电声子相互作用的影响. 电子运动使离子极化，极化了的场又作用于第二个电子，这种由交换虚声子引起的电子-电子间相互作用是引起超导电性的原因. 由于正离子有较大的惯性，使由声子作媒质的电子之间的相互作用是推迟而不是瞬时的，格林函数方法是描写这种推迟效应的有力工具. 本章介绍电声子相互作用的格林函数理论。

§5.1　声子格林函数

第三章讨论相互作用电子气时，假定正电荷是均匀分布的，正离子不运动. 能带论考虑了晶格周期势场对电子的作用. 当考虑晶格振动时，离子偏离平衡位置引起势能的改变，使能带电子受到晶格位移所产生的附加势场的作用，这就是电子与晶格振动的相互作用，晶格运动由声子描写，因此又称为电子与声子的相互作用. 为了用格林函数描写电子-声子相互作用，本节先讨论电声子系统的哈密顿量然后讨论声子格林函数.

一、电子-声子系统

电子-声子系统的哈密顿量可写为

$$\hat{H}=\sum_i\frac{\hat{p}_i^2}{2m}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j|}+\sum_\alpha\frac{\hat{p}_\alpha^2}{2M}+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}V(\boldsymbol{x}_\alpha-\boldsymbol{x}_\beta)+\sum_{i,\alpha}V(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_\alpha)\tag{5.1.1}$$

其中 $\boldsymbol{x}_i$ 是电子坐标，$\boldsymbol{x}_\alpha$ 是离子坐标. 第一项是电子动能，第二项是电子之间的库仑势能，第三项是离子的动能，第四项是离子之间的相互作用能，第五项是电子在离子势场中的势能. (5.1.1)式中同时包含了电子之间的库仑作用和电声子相互作用.

声子系统的哈密顿量是

$$\hat{H}_{ph}=\sum_{\alpha}\frac{p_\alpha^2}{2M}+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}V(\boldsymbol{x}_\alpha-\boldsymbol{x}_\beta) \tag{5.1.2}$$

在一般温度下，离子在平衡位置附近作小振动，位移

$$\delta\boldsymbol{x}_\alpha=\boldsymbol{x}_\alpha-\boldsymbol{x}_\alpha^0 \tag{5.1.3}$$

是小量. 用简谐近似可将离子间的势能写为

$$\frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}V(\boldsymbol{x}_\alpha-\boldsymbol{x}_\beta)=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}V(\boldsymbol{x}_\alpha^0-\boldsymbol{x}_\beta^0)$$

$$+\frac{1}{4}\left[\sum_{\sigma,\rho}(\delta\boldsymbol{x}_\sigma\cdot\nabla_\sigma)(\delta\boldsymbol{x}_\rho\cdot\nabla_\rho)\left\{\sum_{\alpha\neq\beta}V(\boldsymbol{x}_\alpha-\boldsymbol{x}_\beta)\right\}\right]_{\substack{\boldsymbol{x}_\alpha=\boldsymbol{x}_\alpha^0\\ \boldsymbol{x}_\beta=\boldsymbol{x}_\beta^0}} \tag{5.1.4}$$

右方缺少一阶导数，因为 $\boldsymbol{x}_\alpha^0$ 是离子的平衡位置. 上式右方第一项是常数，不出现在 $\delta\boldsymbol{x}_\alpha$ 的运动方程中. 第二项是由许多离子组成的耦合振动系统的弹性恢复力势能. 引入简正坐标，耦合振动系统可分解为若干独立的简正振动模式. 模式的数目等于系统的自由度，目前的情况下是 $3N$，$2N$ 个横向振动模式，N 个纵向振动模式，N 是离子数.

引入简正坐标 $q_{\boldsymbol{k}\lambda}$($\lambda=1,2,3$ 表示三种偏振方向)，

$$\delta\boldsymbol{x}_\alpha=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}q_{\boldsymbol{k}\lambda}\varepsilon_{\boldsymbol{k}\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}_\alpha^0} \tag{5.1.5}$$

$\varepsilon_{\boldsymbol{k}\lambda}$ 是偏振矢量(纵向及横向)，$\boldsymbol{k}$ 限制在第一个布里渊区. $\delta\boldsymbol{x}_\alpha$ 是实数，要求 $q_{\boldsymbol{k}\lambda}^+=q_{-\boldsymbol{k}\lambda}$，$q_{\boldsymbol{k}\lambda}^+$ 是 $q_{\boldsymbol{k}\lambda}$ 的复数共轭. 利用拉氏函数可求出共轭动量为

$$p_x=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k\lambda}p_{k\lambda}\epsilon_{k\lambda}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot x_\alpha^0} \tag{5.1.6}$$

$p_{k\lambda}$ 是对应于广义坐标 $q_{k\lambda}$ 的广义动量．离子的动能加势能可以写为

$$\hat{H}_{\mathrm{ph}}=\sum_{k\lambda}\left\{\frac{1}{2M}p_{k\lambda}p_{-k\lambda}+\frac{1}{2}K_{k\lambda}q_{k\lambda}q_{-k\lambda}\right\} \tag{5.1.7}$$

其中

$$\begin{aligned}K_{k\lambda}\equiv&\sum_{(x_\beta^0-x_{\beta}0)}\left\{(\varepsilon_{k\lambda}\cdot\nabla_\alpha)\ (\varepsilon_{k\lambda}\cdot\nabla_\beta)\left[\frac{1}{2}\sum_{\sigma\neq\rho}V(\boldsymbol{x}_\sigma-\boldsymbol{x}_\rho)\right]\right\}_{x_\alpha-x_\alpha^0}\\&\qquad x e^{\mathrm{i}k(x_\alpha^0-x_\beta^0)}\\=&M(\omega_{k\lambda}^0)^2\end{aligned} \tag{5.1.8}$$

$\omega_{k\lambda}^0$ 是简正模式$(\boldsymbol{k},\lambda)$的自然频率．由 (5.1.5) 式和(5.1.6)式可以解出

$$\begin{aligned}q_{k\lambda}&=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot x^0}\varepsilon_{k\lambda}\cdot\delta\boldsymbol{x}_\alpha\\p_{k\lambda}&=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot x_\alpha^0}\varepsilon_{k\lambda}\cdot\boldsymbol{P}_\alpha\end{aligned} \tag{5.1.9}$$

定义声子场算符 $\varphi_{k\lambda}$ 和 $\hat{\Pi}_{k\lambda}$，

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}_{k\lambda}&=\sqrt{2M\omega_{k\lambda}^0}\,q_{k\lambda}\\\hat{\Pi}_{k\lambda}&=\sqrt{\frac{2}{M\omega_{k\lambda}^0}}\,p_{k\lambda}\end{aligned} \tag{5.1.10}$$

则有

$$H_{\mathrm{ph}}=\frac{1}{4}\sum_{k\lambda}\omega_{k\lambda}^0(\hat{\Pi}_{k\lambda}\hat{\Pi}_{-k\lambda}+\hat{\varphi}_{k\lambda}\hat{\varphi}_{-k\lambda}) \tag{5.1.11}$$

根据量子力学原理，$p_{k\lambda}$ 和 $q_{k\lambda}$ 应满足对易关系

$$[\hat{p}_{k\lambda},\hat{q}_{k'\lambda'}]=-\mathrm{i}\delta_{k,k'}\delta_{\lambda,\lambda'}$$

$$[\hat{q}_{k\lambda},\hat{q}_{k'\lambda'}]=[\hat{p}_{k\lambda},\hat{p}_{k'\lambda'}]=0$$

哈密顿量(5.1.7)式是一系列简谐振子的哈密顿量之和．(5.1.11)

式中 $\boldsymbol{k}$ 与 $-\boldsymbol{k}$ 项仍耦合在一起，为消除 $\boldsymbol{k}$ 与 $-\boldsymbol{k}$ 的交叉项，引入正则变换

$$\hat{\varphi}_{k\lambda}=a_{k\lambda}+a_{-k\lambda} \tag{5.1.12}$$

$$\hat{\Pi}_{k\lambda}=i\,(a^{+}_{k\lambda}-a_{-k\lambda}) \tag{5.1.13}$$

$a^{+}_{k\lambda}$ 和 $a_{k\lambda}$ 分别是声子的产生算符和消灭算符．将此二式代入(5.1.11)式得到

$$\hat{H}_{\text{ph}}=\sum_{k\lambda}\omega^{0}_{k\lambda}\left(a^{+}_{k\lambda}a_{k\lambda}+\frac{1}{2}\right) \tag{5.1.14}$$

(5.1.1)式右边第 5 项可作如下展开

$$\begin{aligned}\sum_{i,\alpha}V(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_\alpha)&=\sum_{i,\alpha}V[(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}^0_\alpha)-(\boldsymbol{x}_\alpha-\boldsymbol{x}^0_\alpha)]\\&=\sum_{i,\alpha}V(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}^0_\alpha)-\sum_{i,\alpha}\delta\boldsymbol{x}_\alpha\cdot\nabla_{xi}V(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}^0_\alpha)\end{aligned} \tag{5.1.15}$$

右方第一项是电子在离子的周期势场中的势能，它与电子动能一起是固体能带论的基本出发点．(5.1.15)式第二项是电子与声子相互作用项，引入简正坐标并用声子场算符表示后该项为

$$\hat{H}_{\text{ep}}=\sum_{i,\ \alpha}\sum_{k,\lambda}\frac{-1}{\sqrt{2NM\omega^{0}_{k\lambda}}}\hat{\varphi}_{k\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}^0_\alpha}\boldsymbol{\varepsilon}_{k\lambda}\cdot\nabla_{xi}V\,(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}^0_\alpha) \tag{5.1.16}$$

它是电子-声子相互作用的哈密顿量．对电子变量进行二次量子化后得到

$$\hat{H}_{\text{ep}}=\sum_{k\lambda}\sum_{p,\ p'}\sum_{\alpha}\frac{-1}{\sqrt{2NM\omega^{0}_{k\lambda}}}\hat{\varphi}_{k\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}^0_\alpha}\,\boldsymbol{\varepsilon}_{k\lambda}\cdot\langle\boldsymbol{p}'\,|\,\nabla_{xi}V\,(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}^0_\alpha)\,|\,\boldsymbol{p}\rangle C^{+}_{p'\sigma}C_{p\sigma} \tag{5.1.17}$$

考虑到

$$\sum_{\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{x}^0_\alpha}=N\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{p})$$

并取 $|\boldsymbol{p}\rangle$ 为平面波态，(5.1.17)式可以写为

$$\hat{H}_{\mathrm{ep}}=\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{k},\lambda} g_{\boldsymbol{k}\lambda}(\boldsymbol{p})c^{+}_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}(a_{\boldsymbol{k}\lambda}+a^{+}_{-\boldsymbol{k}\lambda}) \tag{5.1.18}$$

其中

$$\begin{aligned} g_{\boldsymbol{k}\lambda}(\boldsymbol{p}) &= -\sqrt{\frac{N}{2M\omega^{0}_{\boldsymbol{k}\lambda}}}\varepsilon_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\int \mathrm{d}^{3}x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}\nabla V(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} \\ &= -\sqrt{\frac{N}{2M\omega^{0}_{\boldsymbol{k}\lambda}}}\varepsilon_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\int \mathrm{d}^{3}x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\nabla V(\boldsymbol{x}) \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}}\sqrt{\frac{N}{2M\omega^{0}_{\boldsymbol{k}\lambda}}}\epsilon_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{k}V(\boldsymbol{k}) \end{aligned} \tag{5.1.19}$$

把(5.1.1)式中的电子哈密顿量也写成二次量子化形式，则电子-声子系统的哈密顿量可写为

$$\hat{H}=\hat{H}_{\mathrm{el}}+\hat{H}_{\mathrm{ph}}+\hat{H}_{\mathrm{ep}} \tag{5.1.20}$$

其中

$$\hat{H}_{\mathrm{el}}=\sum_{\boldsymbol{p}}\varepsilon^{0}_{\boldsymbol{p}}c^{+}_{\boldsymbol{p}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}+\frac{1}{2V}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}}V(\boldsymbol{q})\,c^{+}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma_1}c^{+}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}\sigma_2}c_{\boldsymbol{p}\sigma_2}c_{\boldsymbol{k}\sigma_1} \tag{5.1.21}$$

重复的自旋坐标表示求和．$\hat{H}_{\mathrm{ph}}$ 和 $\hat{H}_{\mathrm{ep}}$ 的公式分别是(5.1.14)式和(5.1.18)式．

若只考虑纵声子则可略去 λ，若取 g 为常数，则 $\hat{H}_{\mathrm{ep}}$ 可写为

$$\hat{H}_{\mathrm{ep}}=g\int \mathrm{d}^{3}x\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\hat{\varphi}(\boldsymbol{x}) \tag{5.1.22}$$

$$\varphi(\boldsymbol{x})=\sum_{\boldsymbol{k}}\varphi_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{5.1.23}$$

二、声子格林函数

若考虑声子的偏振方向，则声子场算符可写为

$$\varphi_{\lambda}(\boldsymbol{x})=\sum_{\boldsymbol{q}}\hat{\varphi}_{\boldsymbol{q}\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{5.1.24}$$

这是 Schrödinger 绘景中的场算符，Heisenberg 绘景中的声子场算符是

$$\hat{\varphi}_\lambda(\boldsymbol{x}t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{\varphi}_\lambda(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \tag{5.1.25}$$

$\hat{H}$ 是电子-声子系统的总哈密顿量.

声子格林函数定义为

$$D_\lambda(x_1,x_2)=-\mathrm{i}\langle\Psi_0|T[\hat{\varphi}_\lambda(x_1)\hat{\varphi}^+_\lambda(x_2)]|\Psi_0\rangle \tag{5.1.26}$$

或

$$D_\lambda(\boldsymbol{q},t)=-\mathrm{i}\langle\Psi_0|T[\hat{\varphi}_{q\lambda}(t)\hat{\varphi}^+_{q\lambda}(0)]|\Psi_0\rangle \tag{5.1.27}$$

$|\Psi_0\rangle$是电子-声子系统的基态，$\hat{\varphi}_{q\lambda}(t)$是$\hat{\varphi}_\lambda(\boldsymbol{x}t)$的傅里叶系数

$$\hat{\varphi}_\lambda(\boldsymbol{x},t)=\sum_q\hat{\varphi}_{q\lambda}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}$$

对均匀系统，声子格林函数的傅氏变换是

$$D_\lambda(\boldsymbol{q},q_0)=\int\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q_0t}D_\lambda(\boldsymbol{q},t) \tag{5.1.28}$$

像费密子单粒子格林函数一样，我们也可以引入 D的谱表示. 定义谱函数 $B_\lambda(\boldsymbol{q},\omega)$为

$$B_\lambda(\boldsymbol{q},\omega)=\sum_m|\langle m|\hat{\varphi}^+_{q\lambda}|0\rangle|^2\delta(\omega-\omega_m)$$

$$-\sum_m|\langle m|\varphi_{q\lambda}|0\rangle|^2\delta(\omega+\omega_m) \tag{5.1.29}$$

其中 ω_m 是 n 粒子系统的激发能，$\omega_m=E^n_m-E^n_0$，$D_\lambda(\boldsymbol{q},t)$的傅氏变换可写为

$$D_\lambda(\boldsymbol{q},q_0)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{B_\lambda(\boldsymbol{q},\omega)\mathrm{d}\omega}{q_0-\omega+\mathrm{i}\omega\delta} \tag{5.1.30}$$

其中 $\delta=0^+$. 根据定义 $B_\lambda(\boldsymbol{q},\omega)$是实数，因此 $D_\lambda(\boldsymbol{q},q_0)$ 的虚数部分可以写为

$$\mathrm{Im}D_\lambda(\boldsymbol{q},q_0)=-\pi B_\lambda(\boldsymbol{q},q_0)\mathrm{sgn}q_0 \tag{5.1.31}$$

由此可得到 D 的色散关系为

$$D_\lambda(\boldsymbol{q},q_0)=-\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{Im}D_\lambda(\boldsymbol{q},\omega)\mathrm{sgn}\omega}{q_0-\omega+\mathrm{i}\omega\delta}\mathrm{d}\omega \tag{5.1.32}$$

像 $G(\boldsymbol{k},\omega)$一样，由谱表示可将 $D_\lambda(\boldsymbol{q},q_0)$的定义扩展到复数 q_0 平面上．并可证明，对 $q_0>0$，D 解析延拓后在下半平面的极点给出声子$(\boldsymbol{q},\lambda)$的能量和衰减．

对具有时间反演对称性的系统，B 是 ω 的反对称函数．因此可将 D 写为

$$D_\lambda(\boldsymbol{q},q_0)=\int_0^{\infty}B_\lambda(\boldsymbol{q},\omega)\frac{2\omega}{q_0^2-\omega^2+\mathrm{i}\delta}\mathrm{d}\omega \tag{5.1.33}$$

下面讨论自由声子的格林函数．若在(5.1.25) 式的 $\hat{H}$ 中只考虑声子的哈密顿量则得到自由声子格林函数．相互作用绘景中声子算符的运动方程是

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a_{\boldsymbol{k}\lambda}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_{\mathrm{ph}}t}[a_{\boldsymbol{k}\lambda},\hat{H}_{\mathrm{ph}}]\ e^{-\mathrm{i}\hat{H}_{\mathrm{ph}}t}=-\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{k}\lambda}^0a_{\boldsymbol{k}\lambda}(t)$$

其解为

$$a_{\boldsymbol{k}\lambda}(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{k}\lambda}^0t}a_{\boldsymbol{k}\lambda} \tag{5.1.34}$$

同理可得

$$a_{\boldsymbol{k}\lambda}^+(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{k}\lambda}^0t}a_{\boldsymbol{k}\lambda}^+ \tag{5.1.35}$$

根据定义

$$\begin{aligned}D_\lambda^0(\boldsymbol{q},t-t')&=-\mathrm{i}_p\langle\Phi_0|T[\varphi_{\boldsymbol{q}\lambda}(t)\varphi_{-\boldsymbol{q}\lambda}(t')]|\Phi_0\rangle_p\\&=-\mathrm{i}_p\langle\Phi_0|T\{(a_{\boldsymbol{q}\lambda}e^{-\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}^0t}+a_{-\boldsymbol{q}\lambda}^+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}^0t})\\&\quad\times(a_{-\boldsymbol{q}\lambda}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}^0t'}+a_{\boldsymbol{q}\lambda}^+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}^0t'})\}|\Phi_0\rangle_p\end{aligned}$$

$|\Phi_0\rangle_p$ 是 $T=0\mathrm{K}$ 时声子系统的基态．基态是没有声子的态，所以有

$$\begin{aligned}{}_p\langle\Phi_0|a_{\boldsymbol{q}\lambda}a_{\boldsymbol{q}\lambda}^+|\Phi_0\rangle_p&=1\\{}_p\langle\Phi_0|a_{\boldsymbol{q}\lambda}^+a_{\boldsymbol{q}\lambda}|\Phi_0\rangle_p&=0\end{aligned} \tag{5.1.36}$$

考虑到(5.1.36)式我们得到

$$D_\lambda^0(\boldsymbol{q},\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}D_\lambda^0(\boldsymbol{q},t)$$

$$=-\mathrm{i}\left\{\int_0^\infty \mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega-\omega_{q\lambda}^0)t}+\int_{-\infty}^0 \mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega+\omega_{q\lambda}^0)t}\right\}$$

将上式右方第二个积分变换为从 0 到 ∞ 的积分并利用（1.3.40）式得到

$$D_\lambda^0(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{1}{\omega-\omega_{q\lambda}^0+\mathrm{i}\eta}-\frac{1}{\omega+\omega_{q\lambda}^0+\mathrm{i}\eta}$$

$$=\frac{2\omega_{q\lambda}^0}{\omega^2-(\omega_{q\lambda}^0)^2+\mathrm{i}\eta} \tag{5.1.37}$$

有些作者取声子场算符为

$$\varphi(\boldsymbol{x}t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}\sqrt{\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}^0}{2}}\{a_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega_{\boldsymbol{k}}^0 t]}+a_{\boldsymbol{k}}^+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega_{\boldsymbol{k}}^0 t]}\}$$

这样得到的 $D^0(\boldsymbol{k},\omega)$ 为

$$D^0(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}^0}{2}\left[\frac{1}{\omega-\omega_{\boldsymbol{k}}^0+\mathrm{i}\eta}-\frac{1}{\omega+\omega_{\boldsymbol{k}}^0-\mathrm{i}\eta}\right]$$

$$=\frac{(\omega_{\boldsymbol{k}}^0)^2}{\omega^2-(\omega_{\boldsymbol{k}}^0)^2+\mathrm{i}\delta} \tag{5.1.38}$$

这里只考虑纵声子，所以不必标出声子的偏振方向 λ. 在苏联学者的论著中多使用这种形式.

声子松原函数的定义是

$$\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},\tau)=-\langle T_\tau[\varphi_{q\lambda}(\tau)\varphi_{q\lambda}^+(0)]\rangle \tag{5.1.39}$$

令 $\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\nu_m)$ 代表 $\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},\tau)$ 的傅氏分量，可以求出 $\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},\nu_m)$ 的谱表示为

$$\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\nu_m)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{B_\lambda(\boldsymbol{q},\omega_\lambda)}{\mathrm{i}\nu_m-\omega_\lambda}\mathrm{d}\omega_\lambda \tag{5.1.40}$$

$$B_\lambda(\boldsymbol{q},\omega_\lambda)=\frac{1}{2}\sum_{m,n}\mathrm{e}^{-\beta E_m}|\langle n|\varphi_{q\lambda}(0)|m\rangle|^2(1-\mathrm{e}^{-\beta\omega_\lambda})\delta(\omega_\lambda-E_n+E_m)$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{m,n}\mathrm{e}^{-\beta E_m}|\langle n|\hat{\varphi}_{q\lambda}(0)|m\rangle|^2(1-\mathrm{e}^{\beta\omega_\lambda})\delta(\omega_\lambda+E_n-E_m)$$

(5.1.41)

根据空间反演不变性，$\varphi_{q\lambda}^{+}=\varphi_{-q\lambda}$，故有

$$B_\lambda(\boldsymbol{q},\omega_\lambda)=-B_\lambda(\boldsymbol{q},-\omega_\lambda) \tag{5.1.42}$$

因此有

$$\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\nu_m)=\int_0^\infty \mathrm{d}\omega_\lambda B_\lambda(\boldsymbol{q},\omega_\lambda)\frac{2\omega_\lambda}{(\mathrm{i}\nu_m)^2-\omega_\lambda^2} \tag{5.1.43}$$

自由声子松原函数可求出为

$$\mathscr{D}_\lambda^0(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\nu_m)=\frac{2\omega_{q\lambda}^0}{(\mathrm{i}\nu_m)-(\omega_{q\lambda}^0)^2} \tag{5.1.44}$$

§5.2 电子格林函数和声子格林函数的微扰展开

本节限于讨论 $T=0$ 的情况.

一、坐标空间的费曼图

若不考虑电子之间的库仑作用而只考虑电声子相互作用则电子格林函数可以写为

$$G_{\alpha\beta}(x,x')=-\mathrm{i}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\cdots\mathrm{d}t_n$$

$$\langle\Phi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^{+}(x')\hat{H}_{ep}(t_1)\cdots\hat{H}_{ep}(t_n)]|\Phi_0\rangle_c$$

(5.2.1)

式中的 C 表示只取相连图，$\hat{H}_{\mathrm{ep}}$ 取(5.1.22)式. 一级修正项为

$$G_{\alpha\beta}^1(x-x')=(-\mathrm{i})^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^4x_1 g\langle\Phi_0|\mathrm{T}[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^{+}(x')\hat{\psi}_\delta^{+}(x_1)$$

$\cdot\hat{\psi}_\delta(x_1)\varphi(x_1)]|\Phi_0\rangle$. $|\Phi_0\rangle$ 是不计电声子相互作用时电子-声子系

统的基态，是电子系统基态波函数与声子系统基态波函数的乘积. 上式可以对电子算符和声子算符分别求平均. 因为

$$_p\langle\Phi_0|\varphi(x)|\Phi_0\rangle_p=0$$

因此所有奇次幂的修正项都等于零，微扰级数中只包含 $2n$ 级修正项.

二级修正项为

$$G^2_{\alpha\beta}\ (x-x')=\frac{\mathrm{i}}{2}g^2\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\langle\Phi_0|\mathrm{T}[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')$$

$$\times\hat{\psi}^+_{\gamma 1}(x_1)\hat{\psi}_{\gamma_1}(x_1)\hat{\psi}^+_{\gamma 2}(x_2)\hat{\psi}_{\gamma_2}(x_2)\hat{\varphi}(x_1)\hat{\varphi}(x_2)]|\Phi_0\rangle_e$$

$$=\frac{\mathrm{i}}{2}g^2\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_{2e}\langle\Phi_0|\mathrm{T}[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}^+_\beta(x')\hat{\psi}^+_{\gamma_1}(x_1)\cdot$$

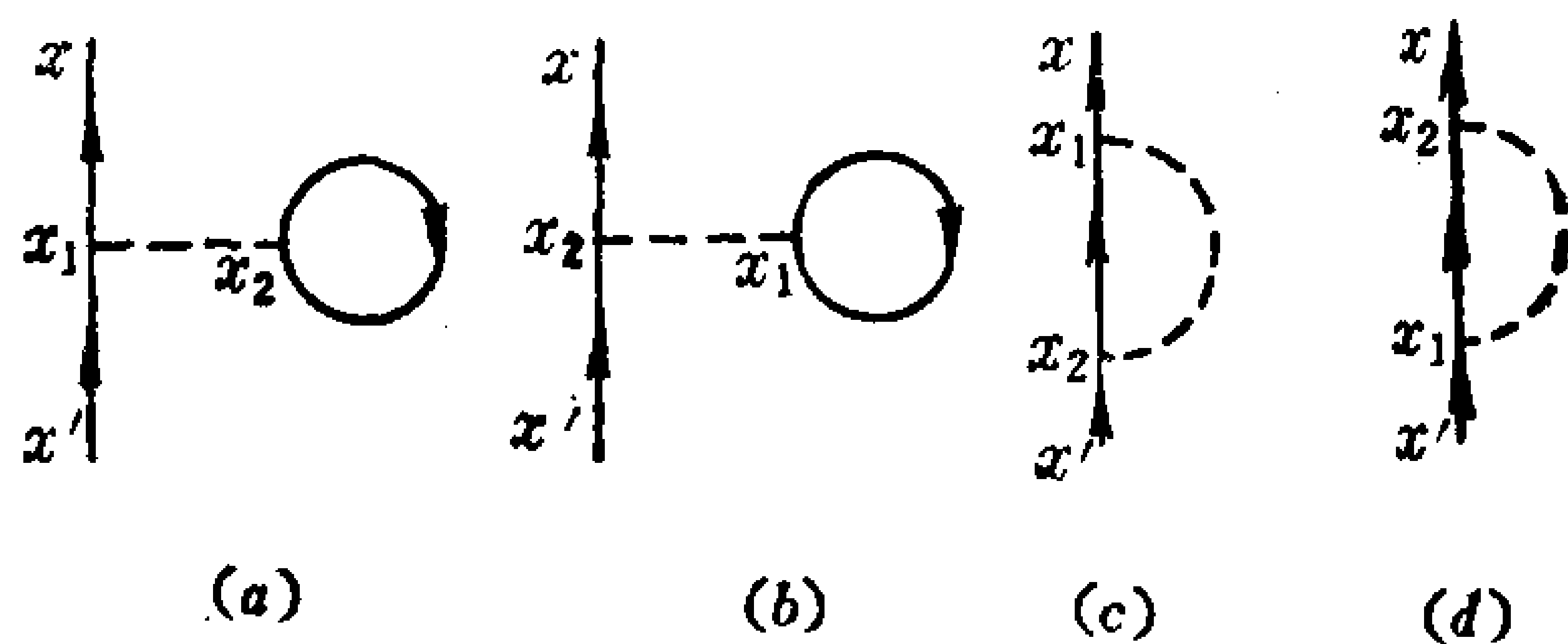
$$\hat{\psi}^+_{\gamma_2}(x_2)\hat{\psi}_{\gamma_2}(x_2)\hat{\psi}_{\gamma_1}(x_1)]|\Phi_0\rangle_e$$

$$\times{}_p\langle\Phi_0|\mathrm{T}[\varphi(x_1)\varphi(x_2)]|\Phi_0\rangle_p \qquad (5.2.2)$$

式中第二个因子

$$_p\langle\Phi_0|\mathrm{T}[\varphi(x_1)\varphi(x_2)]|\Phi_0\rangle_p=\mathrm{i}D^0(x_1-x_2)$$

如果把 $g^2D^0(x_1-x_2)$ 看作二体势，则(5.2.2)式与(1.5.2) 式的形式相同，因而有相同的费曼图. 如果用虚线代表 $D^0(x-x')$，则



(a) (b) (c) (d)

图 5.1

(5.2.2)式的图形为图 5-1. 图(a)和图(b) 的贡献是相同的，图(c)和图(d)的贡献是相同的，将它们相加可以抵消(5.2.2)前面的因子$\frac{1}{2}$. 拓朴等价图形的分析也与 § 1.5 中的分析相同. 因此我们得出结论：电子格林函数的费曼图与有二体相互作用的费密子一样，唯一的改变是作下面的代替

$$V(x_1-x_2)\to g^2D^0(x_1-x_2)$$

对声子格林函数可作同样的分析．它的不等于零的最低级修

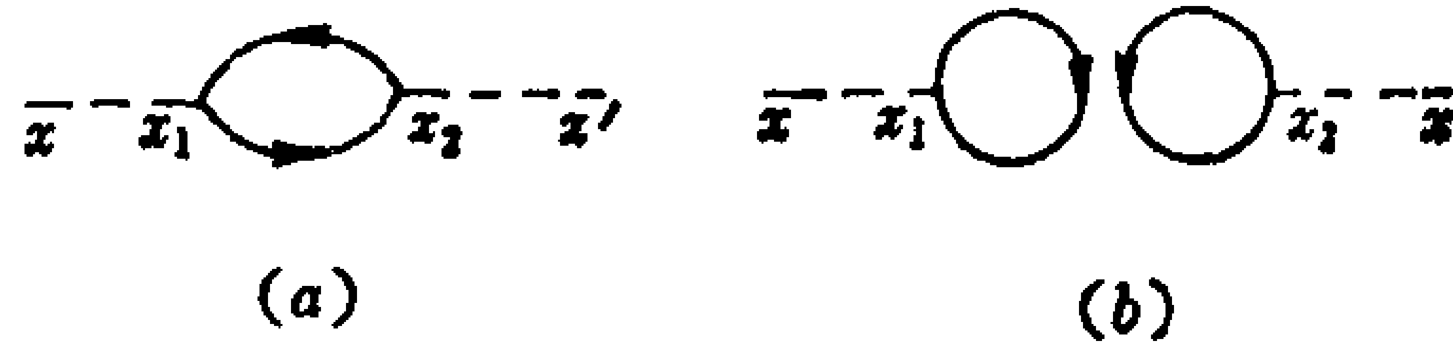


图 5.2

正项来自 $\hat{H}_{ep}$ 的二级项，如图 5.2 所示．其表达式为

$$-g^2\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2D^0(x-x_1)G^0_{\alpha\beta}(x_1-x_2)\,G^0_{\beta\alpha}(x_2-x_1)D^0(x_2-x') \tag{a}$$

$$g^2\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2D^0(x-x_1)G^0_{\alpha\alpha}(0)D^0(x_2-x')G^0_{\alpha\alpha}(0) \tag{b}$$

这样我们就得到计算电子和声子格林函数 $2n$ 级修正项的共同规则为

a．画出有 $2n$ 个顶点的所有拓朴不等价相连图．

b．每条实线对应函数 $G^0_{\alpha\beta}(x-x')$，每条虚线对应函数 $D^0(x-x')$．

c．对所有顶点的坐标积分，对自旋求和．

d．乘以因子 $g^{2n}(-1)^F(\mathrm{i})^n$．$F$ 是封闭的费密环的数目．

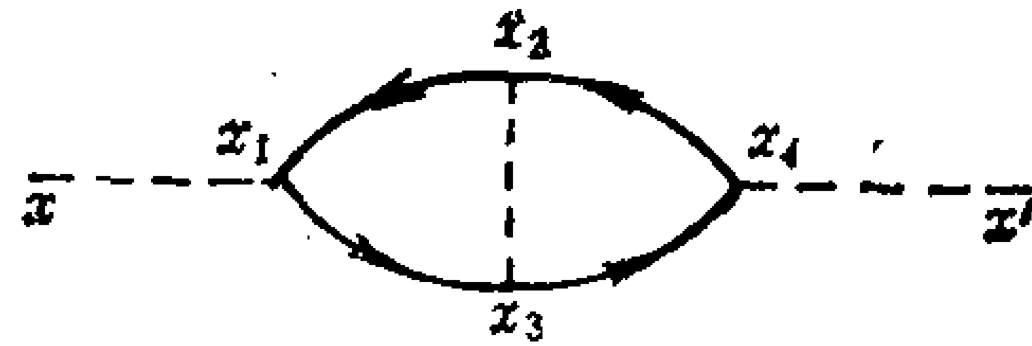


图 5.3

例如图 5.3 的贡献为

$$g^4\int \mathrm{d}^4x_1\cdots\mathrm{d}^4x_4D^0(x-x_1)D^0(x_2-x_3)D^0(x_4-x')$$
$$\times G^0_{\gamma_1\gamma_2}(x_1-x_2)G^0_{\gamma_2\gamma_4}(x_2-x_4)G^0_{\gamma_4\gamma_3}(x_4-x_3)G^0_{\gamma_3\gamma_1}(x_3-x_1) \tag{5.2.3}$$

二、动量空间的费曼图

对电子格林函数和声子格林函数作傅氏变换可以得到动量空间的费曼图. 由前面的分析可以得到电子或声子 $2n$ 级修正图的一般规则:

a, 画出有 $2n$ 个顶点的所有拓朴不等价相连图. 两条外线有相同的外动量,内线的动量在各顶点满足守恒律.

b, 每条实线代表

$$G^0_{\alpha\beta}(k)=\frac{\delta_{\alpha\beta}}{\omega-\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}+\mathrm{i}\,\mathrm{sgn}(\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}-\mu)}$$

c, 每条虚线代表

$$D^0(k)=\frac{2\omega^0_{\boldsymbol{k}}}{\omega^2-\omega^0_{\boldsymbol{k}}+\mathrm{i}\delta}$$

d, 对 n 个独立动量进行积分,对独立自旋变量求和.

e, 乘以 $g^{2n}(2\pi)^{-4n}(i)^n(-1)^F$. F 是封闭电子环的数目.

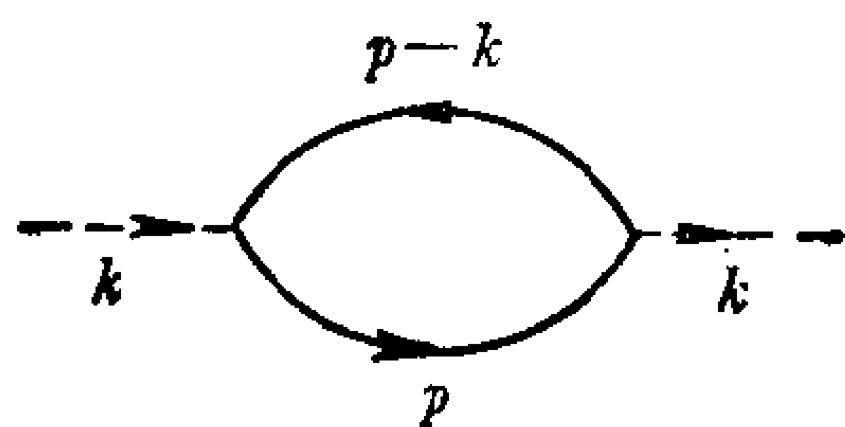


图 5.4

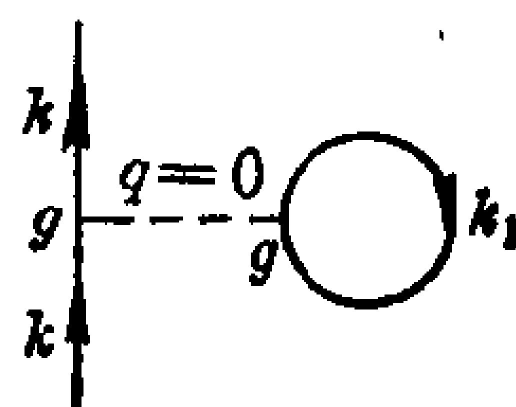


图 5.5

例如,图 5.4 所示二级图的贡献是

$$-2[D^0(k)]^2g^2\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}G^0(p)G^0(p-k) \qquad (5.2.4)$$

动量空间中图 5.1 (a) 变为图 5.5. 其中声子的动量 $\boldsymbol{q}=0$. $\boldsymbol{q}=0$ 只表示晶体的平移或均匀应变,并不代表声子. $\hat{H}_{\mathrm{ph}}$ 中也不包含 $\boldsymbol{q}=0$ 的“声子”. 因此费曼图中将不包含这些项. 类似的项如图 5-2(b)的贡献也等于零.

§ 5.3 Dyson 方程

一、Dyson 方程

引入本征自能后可将电子格林函数写为

$$G=G^0+G^0\Sigma^*G \tag{5.3.1}$$

Σ^* 是本征自能的和. 最简单的本征自能是图 5.6. 在它的内 G^0、D^0 线上引入自能部分可得到更复杂的图. 若用 G、D 代替 G^0、D^0, 我们就得到图 5.7. 它本身代表一种图形求和, 但它不能包括图

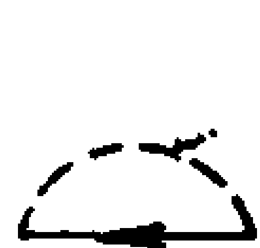


图 5.6



图 5.7



图 5.8



图 5.9

5.8 那类图形. 为此我们引入 "顶角" Γ, 它指一切具有一个声子端和两个电子端的图形的和. 这样我们可以将本征自能的和 Σ^* 用图 5.9 和方程(5.3.2)表示.

$$\Sigma^*(p)=\mathrm{i}g\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}G(p-k)D(k)\Gamma(p-k,p;k) \tag{5.3.2}$$

Dyson 方程可写为

$$G(p)=G^0(p)+G^0(p)\mathrm{i}g\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^4}G(p-k)D(k)\Gamma(p-k,p;k)G(p) \tag{5.3.3}$$

如图 5.10 所示

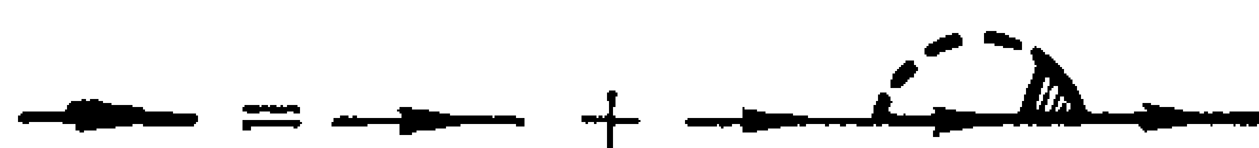


图 5.10



图 5.11

声子本征自能的和记为 Π, 如图 5.11 所示, 其方程是(5.3.4)式

$$\Pi(k)=-2ig\int\frac{d^4p}{(2\pi)^4}G(p)G(p-k)\Gamma(p,p-k;k) \quad (5.3.4)$$

声子格林函数的 Dyson 方程由方程(5.3.5)式和图 5.12 表示

$$D(k)=D^0(k)-D^0(k)2ig\int\frac{d^4p}{(2\pi)^4}G(p)G(p-k)\Gamma(p,p-k;k)D(k) \quad (5.3.5)$$

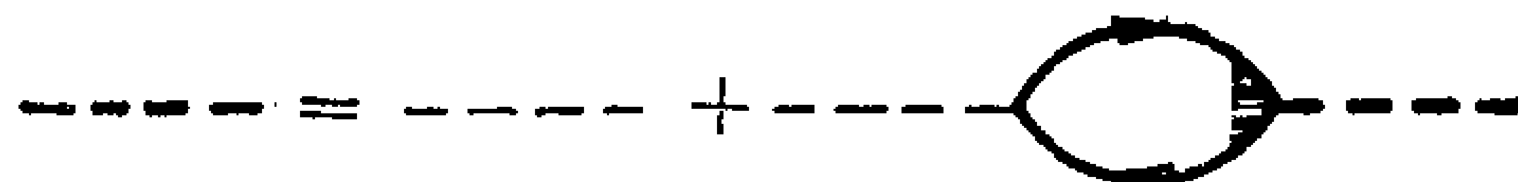


图 5.12

二、电子格林函数的运动方程

电子格林函数运动方程的推导与 § 1-6 节相同. 经过一定运算后我们得到

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right)G_{\alpha\beta}(x,x')=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta}$$
$$-i\langle\Psi_0|T\{[\hat{\psi}_\alpha(x),\hat{H}_{ep}]\hat{\psi}_\beta^+(x')\}|\Psi_0\rangle$$

$\hat{H}_{ep}$ 取(5.1.22)式的形式, 可以证明

$$[\hat{\psi}_\alpha(x),H_{ep}]=g\hat{\psi}_\alpha(x)\varphi(x) \quad (5.3.6)$$

这样我们得到

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right)G_{\alpha\beta}(x,x')$$
$$=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta}-ig\langle\Psi_0|T[\hat{\psi}_\alpha(x)\hat{\psi}_\beta^+(x')\phi(x)]|\Psi_0\rangle$$
$$=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta}-igP_{\alpha\beta}(x,x';x) \quad (5.3.7)$$

其中

$$P_{\alpha\beta}(x_1,x_2;x_3)=\langle\Psi_0|T[\hat{\psi}_{H\alpha}(x_1)\hat{\psi}_{H\beta}^+(x_2)\phi_H(x_3)]|\Psi_0\rangle \quad (5.3.8)$$

它对应于有一个声子端和两个电子端的费曼图的集合. 其微扰展开是

$$P_{\alpha\beta}(x_1,x_2;x_3)=\langle\Phi_0|\mathrm{T}[\hat{\psi}_\alpha(x_1)\hat{\psi}^+_\beta(x_2)\hat{\varphi}(x_3)\times S(\infty,-\infty)]|\Phi_0\rangle \tag{5.3.9}$$

$$S(\infty,-\infty)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i})^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\cdots\times\mathrm{d}t_n\mathrm{T}[\hat{H}_{\mathrm{ep}}(t_1)\cdots\hat{H}_{\mathrm{ep}}(t_n)] \tag{5.3.10}$$

$P_{\alpha\beta}$ 的零级近似等于零，因为基态无声子．一级近似为

$$-\mathrm{i}g\langle\Phi_0|\mathrm{T}[\hat{\psi}_\alpha(x_1)\hat{\psi}^+_\beta(x_2)\varphi(x_3)\int\mathrm{d}^4x_4\hat{\psi}^+_\gamma(x_4)\hat{\psi}_\gamma(x_4)\varphi(x_4)]|\Phi_0\rangle$$

$$=-\delta_{\alpha\beta}g\int\mathrm{d}^4x_4G^0_{\alpha\gamma}(x_1-x_4)G^0_{\gamma\beta}(x_4-x_2)D^0(x_3-x_4)$$

它的费曼图示于图 5-13 中．通过与 § 1-6 类似的讨论可以得到

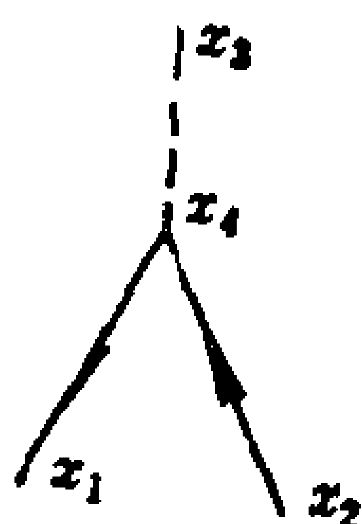


图 5.13

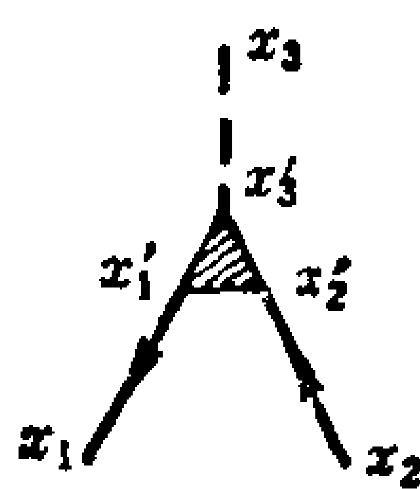


图 5.14

$P_{\alpha\beta}$ 的费曼图，示于图 5-14 中．$P_{\alpha\beta}$ 的公式是

$$P_{\alpha\beta}(x_1,x_2;x_3)=\delta_{\alpha\beta}P(x_1,x_2;x_3)$$

$$=-\delta_{\alpha\beta}\int\mathrm{d}^4x_1'\,\mathrm{d}^4x_2'\,\mathrm{d}^4x_3'\,G(x_1-x_1')G(x_2'-x_2)\cdot D(x_3'-x_3)\Gamma(x_1',x_2';x_3') \tag{5.3.11}$$

函数 Γ 代表所有具备三条外线（一条声子线和两条电子线）的图形的和．它正是电声子相互作用的顶角部分．由于空间均匀性，Γ 和 P 只与两个坐标差有关，因此 Γ 的傅氏变换定义如下，

$$\Gamma(p,p-k;k)(2\pi)^4\delta(p-p'-k)$$

$$=\int\mathrm{d}^4x_1\mathrm{d}^4x_2\mathrm{d}^4x_3\Gamma(x_1,x_2;x_3)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px_1+\mathrm{i}p'x_2+\mathrm{i}kx_3} \tag{5.3.12}$$

Γ 和 P 的傅氏分量的关系为

$$P(p,p-k;k)=-G(p)G(p-k)D(k)\Gamma(p,p-k;k) \quad (5.3.13)$$

将(5.3.11)式的 P 代入(5.3.7) 式并作以上变换就可得到电子格林函数的 Dyson 方程.

三、Migdal 定理

电子自能与声子自能都包含顶角部分 Γ. Γ 是具有一个声子端和两个电子端的图形的总和，如图 5.15 所示. 可以证明,每增加一根声子线,相应图形的贡献将减小$(m/M)^{1/2}$倍，m 是电子

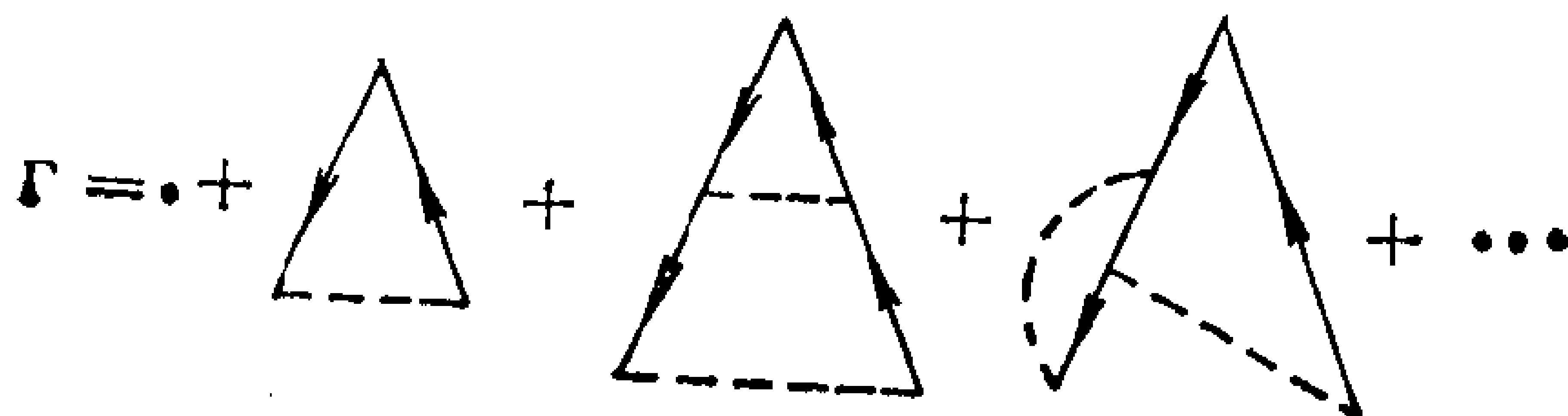


图 5.15

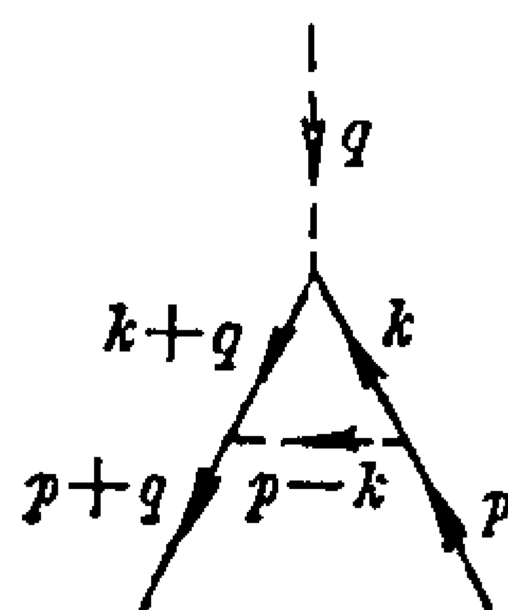


图 5.16

质量,M 是离子质量. 这是 Migdal 首先证明的，称为 Migdal 定理. 对一般金属$(m/M)^{1/2}\approx10^{-2}$—$10^{-3}$. 因此可以只保留零级顶角而不考虑顶角的高级修正. 零级顶角 $\Gamma^0=g$. 一级顶角修正如图 5-16 所示,其公式为

$$\Gamma^1(p,q)\propto|g|^2g\int\frac{\mathrm{d}^3k\mathrm{d}k_0}{(2\pi)^4}G^0(k+q)G^0(k)D^0(p-k) \quad (5.3.14)$$

$$D^0(p-k)=\frac{2\omega^0_{p-k}}{(p_0-k_0)^2-(\omega^0_{p-k})^2+i\delta} \quad (5.3.15)$$

一般金属的费密能 $\varepsilon_\mathrm{F}\approx10\mathrm{eV}$. 德拜温度 $\Theta\approx10^2$—$10^3\mathrm{K}$, $\hbar\omega_D=k_\mathrm{B}\times\Theta\approx0.1\mathrm{eV}$,所以$\hbar\omega_D/\varepsilon_\mathrm{F}\approx10^{-2}$—$10^{-3}$. (5.3.15)中$p_0-k_0$是声子能量，它的最大值是 $\hbar\omega_\mathrm{D}$，比处于费密面上的电子的能量小得多(约千分之一). 所以图 5-16 中的电子 p 和电子 k 的能量相差很

小，电子是在费密面附近散射，我们有

$$|\boldsymbol{p}|\approx k_{\mathrm{F}},\ |\boldsymbol{k}|\approx k_{\mathrm{F}},\ |\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|\approx k_{\mathrm{F}} \tag{5.3.16}$$

以费密面作为测量能量的起点，则 $p_0\lesssim\omega_{\mathrm{D}}, q_0\leqslant\omega_{\mathrm{D}}$. 又因为 k_0 比 ω_{D} 大时 D 将按 k_0^{-2} 减小，所以对 k_0 积分有贡献的主要区间亦在 ω_{D} 数量级，于是 $D^0\sim\dfrac{1}{\omega_{\mathrm{D}}}$，而

$$\Gamma^1\approx|g|^2g\frac{1}{\omega_{\mathrm{D}}}\int \mathrm{d}^3k\int \mathrm{d}k_0\frac{1}{k_0-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0+\mathrm{i}\,\mathrm{sgn}(k-k_{\mathrm{F}})\delta}\times\frac{1}{k_0+q_0-\varepsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^0+\mathrm{i}\,\mathrm{sgn}(k-k_{\mathrm{F}})\delta}$$

鉴于上述对积分区间的限制，对 $\boldsymbol{k}$ 积分的贡献主要来自使 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0$ 和 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^0$ 近似等于 ω_{D} 的区间. 所以可把对 k_0 的积分限扩充到无穷大，显然此时只有 $|\boldsymbol{k}|>k_{\mathrm{F}}, |\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|<k_{\mathrm{F}}$ 或反过来 $|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}, |\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|>k_{\mathrm{F}}$ 时，对 k_0 的积分才不等于零，我们有

$$\Gamma^1\approx|g|^2g\frac{1}{\omega_{\mathrm{D}}}\int'\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{q_0+(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\varepsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^0)}$$

积分号上的一撇表示限于满足上述限制的积分区间. 由于这样的限制，$\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0-\varepsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^0\approx\omega_{\mathrm{D}}$，而积分区域的大小$\approx\dfrac{\omega_{\mathrm{D}}^2}{\varepsilon_{\mathrm{F}}}N(0)$，$N(0)$ 是费密面附近的电子态密度. 所以

$$\Gamma^1\approx|g|^2g\frac{N(0)}{\omega_{\mathrm{D}}}\cdot\frac{\omega_{\mathrm{D}}}{\varepsilon_{\mathrm{F}}}$$

因为 $|g|^2N(0)/\omega_{\mathrm{D}}\approx1$，所以有.

$$\frac{\Gamma^1}{\Gamma^0}\approx|g|^2\frac{N(0)}{\omega_{\mathrm{D}}}\frac{\omega_{\mathrm{D}}}{\varepsilon_{\mathrm{F}}}\approx\frac{\omega_{\mathrm{D}}}{\varepsilon_{\mathrm{F}}}\approx\left(\frac{m}{M}\right)^{1/2}$$

一般说来，对更高级的顶角修正，每增加一根内声子线，也将增加一个因子 $\omega_{\mathrm{D}}/\varepsilon_{\mathrm{F}}$. 这就是 Migdal 定理.

根据 Migdal 定理，在图 5-15 中只要取最低级的近似就可以了，也就是取 $\Gamma=g$.

§5.4 耦合电声子系统

本节同时考虑电子－声子相互作用和电子之间的库仑相互作用. 传导电子对离子之间的相互作用及电子之间的库仑作用都有屏蔽作用. 这种屏蔽对声子频率和电声子相互作用矩阵元都有重要的影响.

一、声子频率的重整化

电子屏蔽正离子之间的势，使离子振动频率发生变化. 考虑电子之间的库仑作用，同时考虑电声子相互作用时声子格林函数如图 5-12 所示，重写为图 5-17 的形式. 根据定义，Π是声子不可约自能的和，即一切不能由切断一根声子线而分为两部分的声

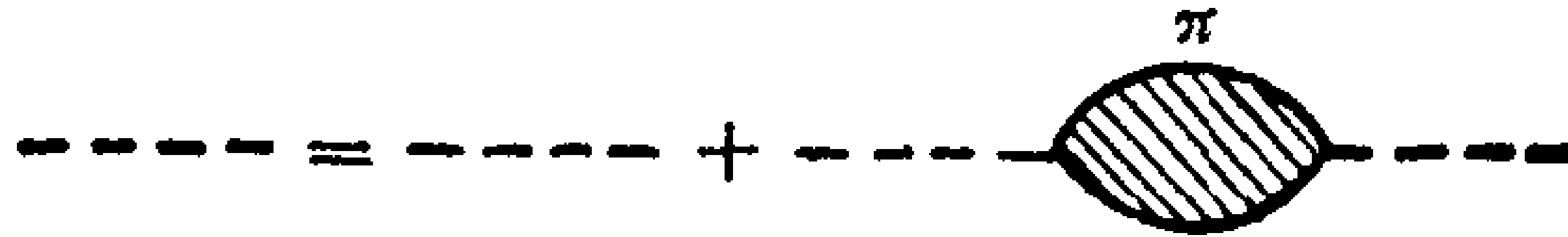


图 5.17

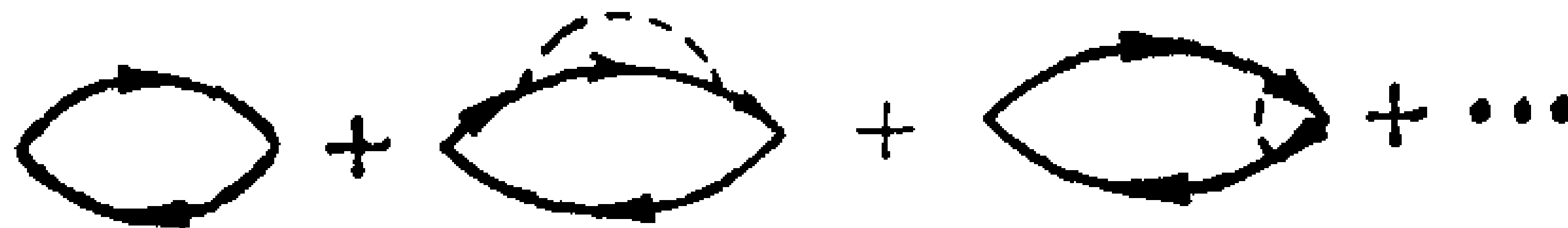


图 5.18

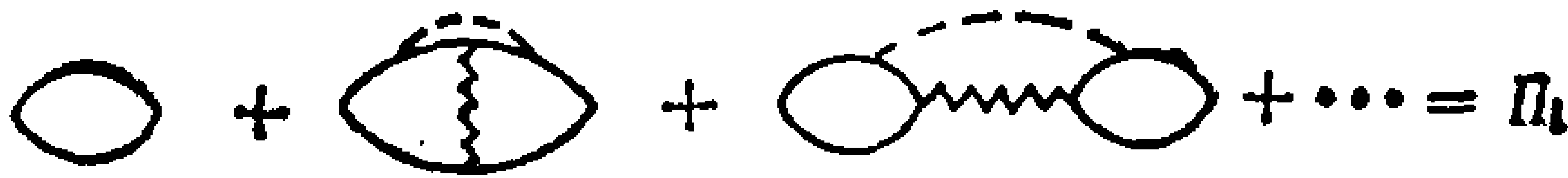


图 5.19

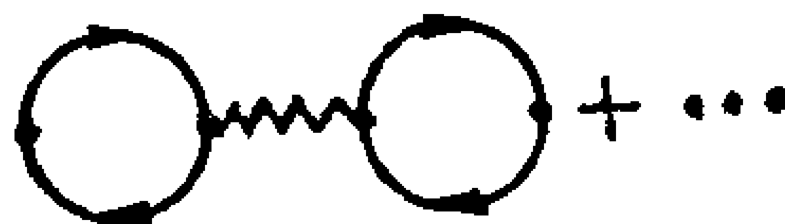


图 5.20

子自能的和. 若只考虑电声子相互作用, Π 包括如下的图. 同时考虑电声子和电子之间的库仑作用时, Π 包括两类图. 一类如图 5-19所示, 它不能由切断一根声子线或一根库仑线而分为两部分. 这一类声子自能的和记为Π_1. 还有一类不能由切断一根库仑线而分为两部分, 如图 5-20 所示. 容易证明, 总的声子自能可以写为

$$\Pi = \Pi_1 + \Pi_1 V \Pi_1 + \Pi_1 V \Pi_1 V \Pi_1 + \cdots = \Pi_1 + \Pi_1 V \Pi$$

由此可以解出

$$\Pi = \frac{\Pi_1}{1 - V\Pi_1} \tag{5.4.1}$$

$\Pi_1(q) = g_{ql}^* \bigcirc g_{ql} + g_{ql}^* \bigcirc \sim\bigcirc g_{ql} + g_{ql}^* \bigcirc\sim\bigcirc\sim\bigcirc g_{ql} + \cdots$

图 5.21

取环图近似, 即取 $\Pi_1 = \Pi^0$, 则 Π 的图为图 5.21. 声子的 Dyson 方程可写为

$$D_l(q) = D_l^0(q) + D_l^0(q) \Pi_l(q) D_l(q) \tag{5.4.2}$$

l 代表声子的偏振. 以下只讨论纵声子.

图 5.22

用环图近似, 有效库仑势可表示为图 5.22, 由此可得到图

$\frac{V_c(q) - V(q)}{V^2(q)} = \bigcirc + \bigcirc\sim\bigcirc + \bigcirc\sim\bigcirc\sim\bigcirc + \cdots$

图 5.23

5.23. 与图 5-21 比较可得到

$$\Pi_l(q) = g_{ql}^* \left[\frac{V_c(q) - V(q)}{V^2(q)} \right] g_{ql}$$

$$=\frac{|g_{ql}|^2}{V(q)}\left[\frac{1}{\kappa_r(q)}-1\right] \tag{5.4.3}$$

由 Dyson 方程

$$D_l(q)^{-1}=D_l^0(q)^{-1}-\Pi_l(q) \tag{5.4.4}$$

并引用凝胶模型中的公式

$$\Omega_{ql}^2=\frac{2|g_{ql}|^2\Omega_{ql}}{V(q)} \tag{5.4.5}$$

我们得到

$$D_l(q)=\frac{2\Omega_{ql}}{q_0^2-\frac{2|g_{ql}|^2\Omega_{ql}}{V(q)\kappa_r(q)}-\left[\Omega_{ql}^2-\frac{2|g_{ql}|^2\Omega_{ql}}{V(q)}\right]+\mathrm{i}\delta}$$

$$=\frac{2\Omega_{ql}}{q_0^2-\frac{\Omega_{ql}^2}{\kappa_r(q)}+\mathrm{i}\delta} \tag{5.4.6}$$

其中的 Ω_{ql} 即(5.1.37) 式中的 ω_{ql}^0. D 的极点决定重整化声子频率 ω_{ql}, 我们有

$$\omega_{ql}^2=\frac{\Omega_{ql}^2}{\kappa_r(\boldsymbol{q},\omega_{ql})} \tag{5.4.7}$$

它表明, 由于传导电子对离子间相互作势的屏蔽, 声子频率已发生变化. 由于电子运动快而离子运动慢, (5.4.7) 中可以取静态介电常数 $\kappa_r(\boldsymbol{q},0)$, 在长波极限

$$\kappa_r\underset{q\to 0}{(\boldsymbol{q},0)}=\frac{1}{1+q_{\mathrm{TF}}^2/q^2} \tag{5.4.8}$$

由此得到

$$\omega_{ql}^2=\frac{\Omega_{ql}^2}{1+q_{\mathrm{TF}}^2/q^2}\approx\frac{mZ}{3M}v_{\mathrm{F}}^2q^2 \tag{5.4.9}$$

$$\omega_{ql}=\left(\frac{mZ}{3M}\right)^{1/2}v_{\mathrm{F}}q \tag{5.4.10}$$

这样, 重整化后的纵声子有声波型色散关系, 声速为 $(mZ/3M)^{1/2}v_{\mathrm{F}}$. 对简单金属由(5.4.10)得到的声速与实验结果符合.

以上结果说明如下：如果我们从裸声子哈密顿量出发，不计电子-电子和电子-声子相互作用，只考虑离子-离子相互作用，则得到一组裸的本征频率和简正振动模．离子振动的时候，裸声子哈密顿量将电子气看作刚性的背景，电子并不跟随离子运动．离子运动将引起附加的长程库仑势，并产生离子的等离子体振荡．长波声子的频率就是等离子振荡的频率

$$\omega_{ip}^2=\frac{4\pi e^2Z^2n_i}{M}$$

n_i 是正离子的密度．H_{ph} 的等离子体模并不是光学模，因为我们已假设每个元胞中只有一个原子．一般固体和金属中原子和离子的长波振动由声学声子描述，其色散关系是 $\omega(q)=C_Sq$，C_S 是声速．这说明裸声子哈密顿量是不实际的，与实际金属的情况不符合．金属中电子和离子的质量相差很大，对外界的响应也不同．离子运动时电子跟随离子运动，离子之间的势受到屏蔽，并不存在长程库仑场，因而也不存在离子的等离子体波．因为离子很重不能跟随电子，因而电子可以作等离子体振荡．裸声子哈密顿 $\hat{H}_{ph}$ 未考虑电子跟随正离子的运动，不能给出正确的答案．如果我们从包括电子-电子相互作用及电子-声子相互作用的(5.1.1)式出发，对声子模我们将得到一组新的方程，这些新的方程包含了电子的屏蔽效应因而能正确描写离子的振动．裸声子系统的本征态是一种有用的概念，用它可以讨论格林函数的解．

二、对电声子相互作用的屏蔽

传导电子对电子-声子相互作用也有屏蔽效应．若不考虑电子之间的库仑作用则电子-声子顶角的最低级费曼图是图 5.24 (a)．若考虑库仑作用则顶角也包括图 5.24 中其它的费曼图，其中 Π_1 是库仑作用的正规极化部分．由图 5.24 我们得到有效电子-声子

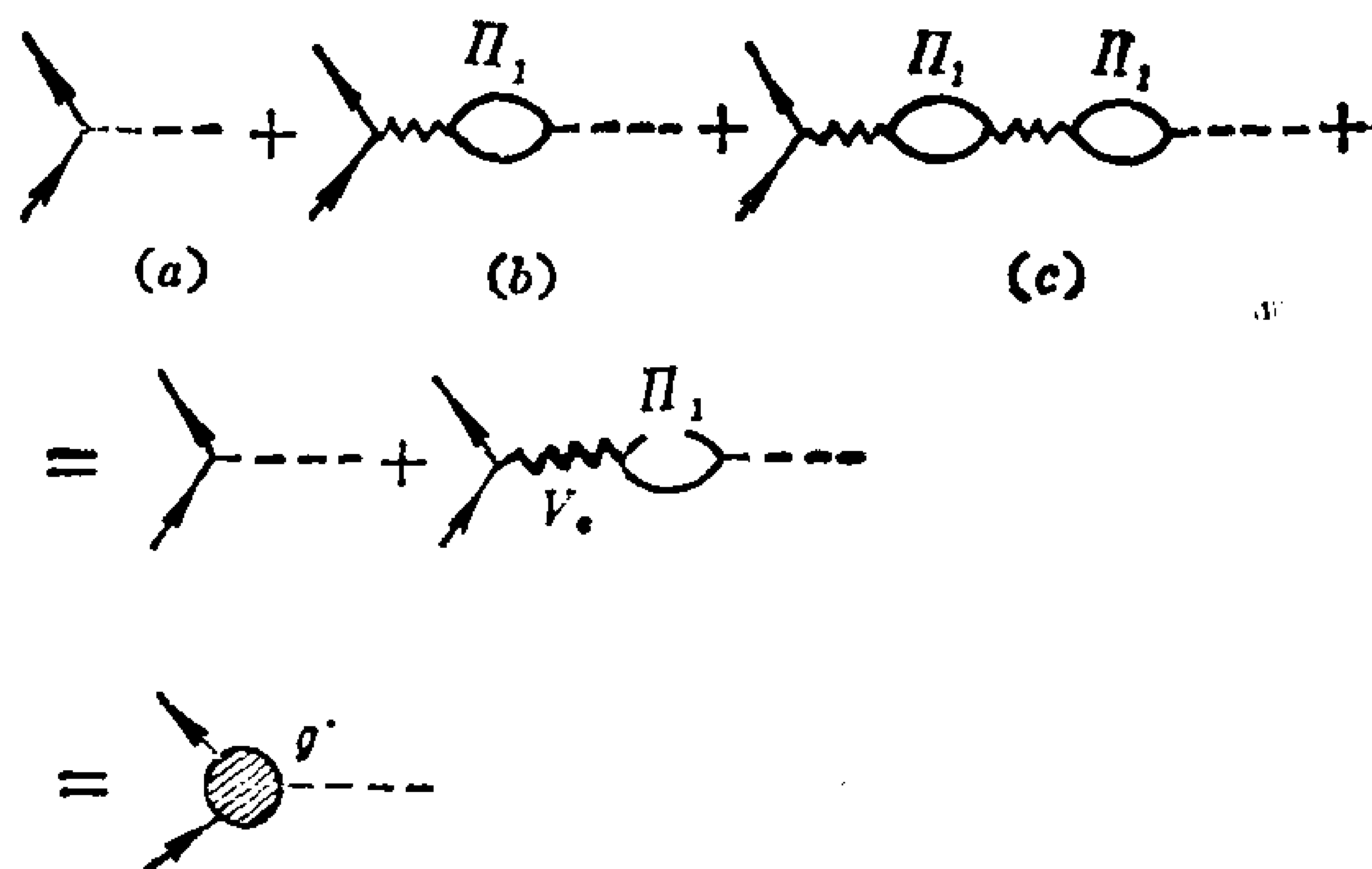


图 5.24

耦合强度为

$$g' = g + gV_c\Pi_1 = \frac{g}{1 - V\Pi_1} \tag{5.4.11}$$

用环图近似，$\Pi_1 = \Pi^0$，我们得到

$$g' = \frac{g}{\kappa_r(q)} \tag{5.4.12}$$

屏蔽以后的电子 - 声子相互作用将是短程的，只扩展到几个原子间距.

图 5-24 中包含简单库仑顶角. 这个顶角还可以复杂化. 它可以包括图 5.25 中的图. 根据 Migdal 定理，电子-声子相互作用对

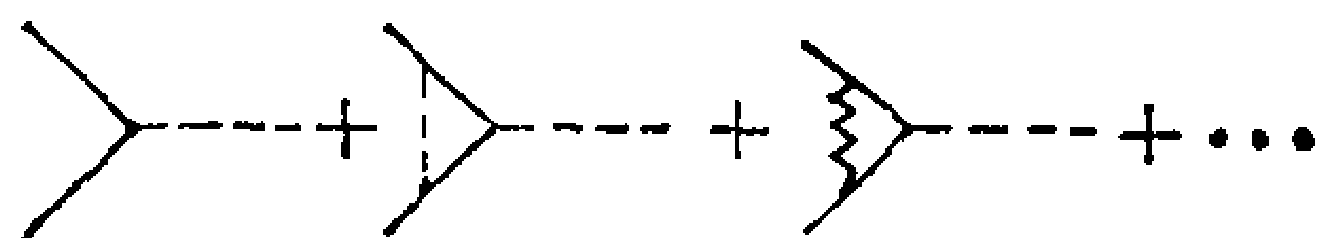


图 5.25

顶角的修正可以忽略，我们只需考虑库仑作用对顶角的修正. 对图 5.26 的费曼图求和，得到的结果是

$$\bar{g} = g\frac{\Lambda(q)}{\kappa_r(q)} \tag{5.4.13}$$

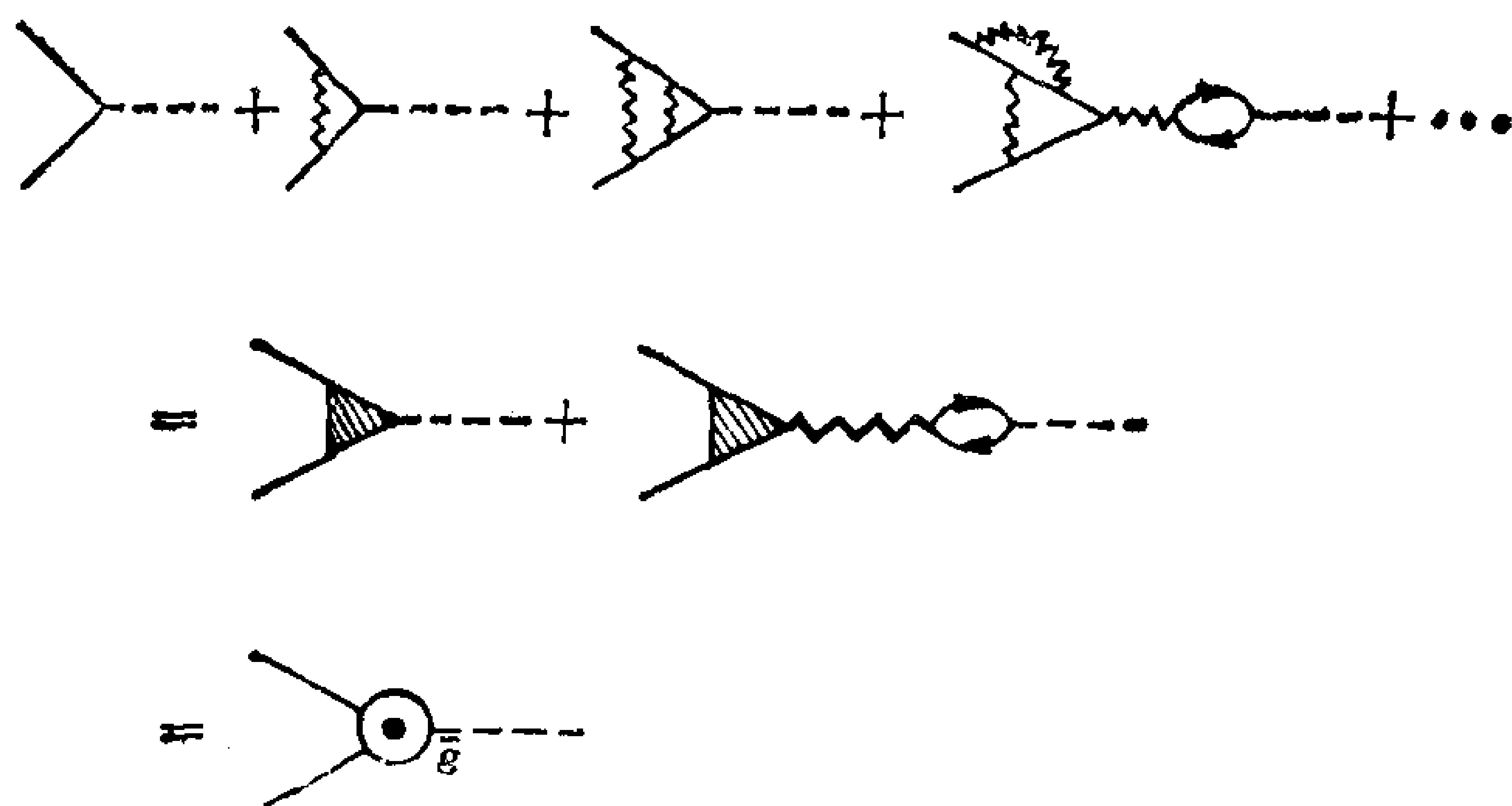


图 5.26

$\Lambda(q)$代表库仑顶角.

三、电子之间的有效势

若只考虑电子之间的库仑作用，电子之间的有效势是

$$V_c(q)=\frac{V(q)}{\kappa(q)}$$

同时考虑电子-声子相互作用后，微扰展开中有图 5-27 和类似的更高级的图.这也是一种有效势，是由声子作媒介所产生的电子之间的相互作用.图 5.27 可以看作一个电子发射的虚声子被另一个电子所吸收，从而产生电子之间的有效相互作用.有效相互作用的物理图象是很清楚的.所谓电子发散虚声子，就是在这个电子周围产生了晶格畸变或极化，若另一个电子靠近畸变区，它必然受到附

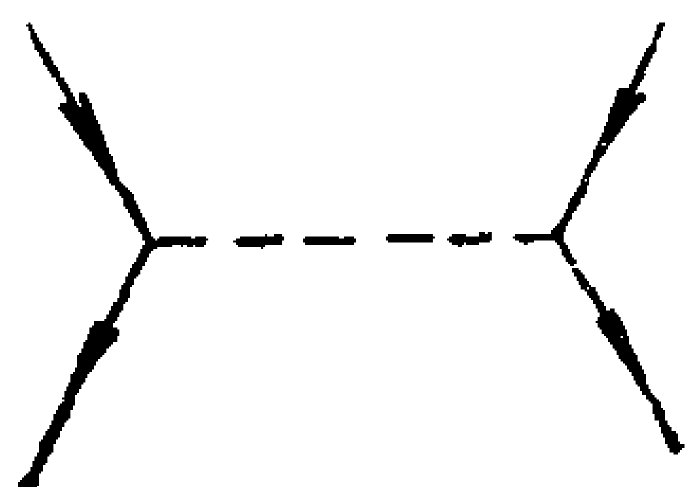
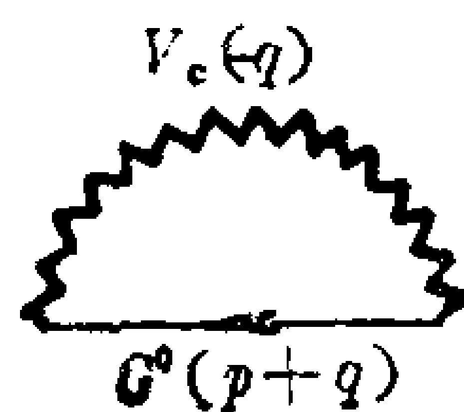


图 5.27



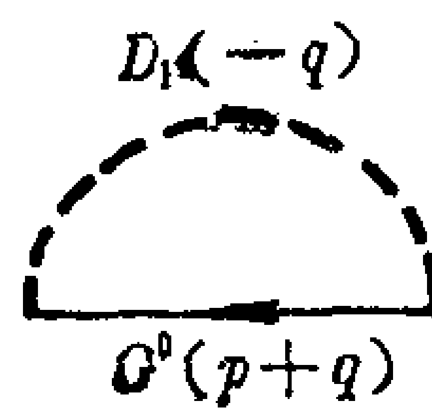


图 5.28

加的吸引或排斥作用，但这不是电子间的直接库仑相互作用，而是通过晶格振动传递的有效相互作用.

为讨论有效势我们研究电子自能图形，电子自能中的库仑线和声子线都是电子之间的相互作用势. 作为近似我们只取图 5.28 中的图形. 电子自能可写为

$$\Sigma(p)=\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}G^0(p+q)[V_c(q)+|g'_{ql}|^2D_l(-q)]$$

(5.4.14)

利用(5.4.5)式，(5.4.14)式可简化为

$$\Sigma(p)=\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}G^0(p+q)V_c(q)\left[\frac{q_0^2}{q_0^2-\Omega_{ql}^2/\kappa_r(q)+\mathrm{i}\delta}\right]$$

(5.4.15)

或写为

$$\Sigma(p)=\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}G^0(p+q)\frac{V(q)}{1-V(q)\Pi^*(q)-\Omega_{ql}^2/q_0^2+\mathrm{i}\delta}$$

(5.4.16)

(5.4.16)式的分母是包括电子极化和离子极化的总介电常数.

因此，电子之间总的屏蔽势等于裸库仑势 $V(q)$ 除以介质的总介电常数. 由(5.4.15)式可以看出，若 $q_0^2<\omega_{ql}^2$，有效势是吸收的，相应于振动离子对电子间库仑排斥的过屏蔽. $q_0^2>\omega_{ql}^2$ 时是欠屏

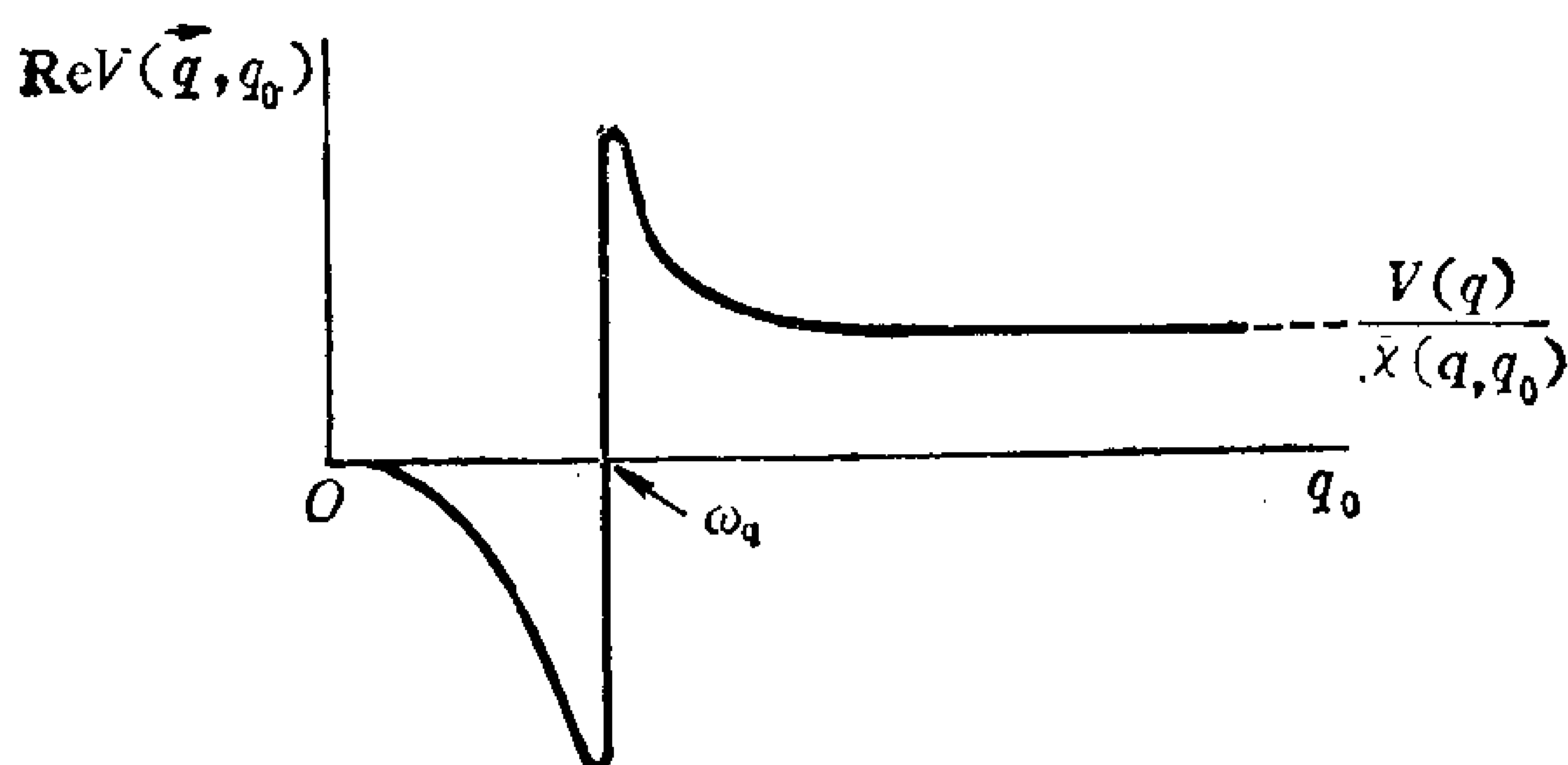


图 5.29

蔽，有效排斥势比原来的势要强些，这个现象在介电理论中称为介电反常. $q_0^2 \gg \omega_{q\,l}^2$ 时离子极化可以忽略，裸势只由导电电子屏蔽. 对于一定的 q，有效势与 q_0 的关系示于图 5.29 中. 它的吸引势区域与超导电性密切相关.

参 考 文 献

[1] V. Ambegaoker and L. Tewordt, *Phys. Rev.*, **134** (1964), *A* 805.

[2] R.E. Prange, L. P. Kadanoff, *phys. Rev.*, **134** (1964), *A* 566.

[3] W.L. McMillan, *Phys. Rev.*, **167** (1968), 331.

[4] A.A. 阿布里科索夫, Л.П. 戈尔可夫, И.E. 加洛辛斯基, 统计物理学中的量子场论方法, 科学出版社, (1963).

[5] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York, (1981).

[6] J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Benjamin, New York, (1964).

[7] J.M. Ziman, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press, Oxford, (1960).

[8] A. Migdal, *Sov. Phys., JEPT.* **7** (1958) 916

第六章 固体电导

§6.1 引 言

绝对零度时，纯金属晶体中电子不受散射，具有无穷大电导. $T>0$ 时实际金属的电阻是由电子受到杂质和晶格振动的散射引起的. 长期以来电导问题是用 Boltzmann 方程处理的. 1958 年 Edward 首先将格林函数方法应用于输运问题. Kadanoff 和 Baym 用格林函数方法证明，在金属中只有 $k_F l \gg 1$ 时 Boltzmann 方程才是正确的，l 是平均自由程. 现在格林函数已用于推导很多不同系统的输运性质，包括 Boltzmann 方程不适用的情况. 格林函数方法的优点是，用它可以推导出输运系数的准确表示式. 然后在各种条件下作近似计算. 本节只介绍杂质对输运过程的影响，并且只限于杂质浓度小的情况. 假定 $k_F l \gg 1$. 在此条件下可以推导电导的解析公式，对于复杂的情况，经常需要作数值计算. 本节简单介绍 Boltzmann 方程的理论，以与格林函数方法进行对比.

假定一系统中有无规分布的杂质，这些杂质是相互独立的. 单电子态是平面波，但受到孤立杂质的散射. 如果杂质浓度很小则可以忽略散射事件之间的干涉. 电子分布函数 $f(\boldsymbol{k},t)$ 由下面的 Boltzmann 方程决定，即

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\nabla f+\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial t}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}} f=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c \tag{6.1.1}$$

在以上假定条件下，f 与 $\boldsymbol{r}$ 无关. 如果讨论直流电导则 f 也不依赖于时间. (6.1.1)式简化为

$$\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial t}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}} f=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c \tag{6.1.2}$$

$\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial t}$等价于加速度，有电磁场时

$$\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial t}=-e\boldsymbol{E}-\frac{e}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{H} \tag{6.1.3}$$

我们只讨论电导，所以 $\boldsymbol{H}=0$，(6.1.2)式变为

$$-e\boldsymbol{E}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}f(\boldsymbol{k})=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c \tag{6.1.4}$$

右边的碰撞项可以用弛豫时间近似写为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c=-\frac{f(\boldsymbol{k})-f_0(\boldsymbol{k})}{\tau_1(\boldsymbol{k})} \tag{6.1.5}$$

f_0是平衡态分布函数．(6.1.5) 式可以看作弛豫时间 τ_1 的定义．由(6.1.4)和(6.1.5)式可将分布函数写为

$$f(\boldsymbol{k})=f_0(\boldsymbol{k})+e\tau_1\boldsymbol{E}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}f(\boldsymbol{k}) \tag{6.1.6}$$

电场很小时电流也很小，系统偏离平衡也很小．将 f 写为 $f=f_0+f_1$，则 f_1 也很小，故可在(6.1.6) 式第二项中用平衡态分布函数 f_0 代替 f，则有

$$f(\boldsymbol{k})=f_0(\boldsymbol{k})+e\tau_1(\boldsymbol{k})\boldsymbol{E}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}f_0(\boldsymbol{k})$$

或写为

$$f(\boldsymbol{k})=f_0(\boldsymbol{k})+e\tau_1(\boldsymbol{k})\frac{\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{k}}{m}\frac{\partial f_0(\boldsymbol{k})}{\partial\varepsilon_{\boldsymbol{k}}} \tag{6.1.7}$$

电流密度可写为

$$\boldsymbol{J}=-en_0\langle\boldsymbol{v}\rangle=-en_0\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}f(\boldsymbol{k})\,\frac{\boldsymbol{k}}{m} \tag{6.1.8}$$

n_0是电子密度．分布函数的归一化要求

$$\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}f(\boldsymbol{k})=\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}f_0(\boldsymbol{k})=1 \tag{6.1.9}$$

将(6.1.7)式代入(6.1.8)式得到

$$\boldsymbol{J}=-e^2n_0\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\tau_1(\boldsymbol{k})\boldsymbol{v}_k(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}_k)\frac{\partial f_0(\boldsymbol{k})}{\partial\varepsilon_{\boldsymbol{k}}} \tag{6.1.10}$$

其中 $\boldsymbol{v}_k=\boldsymbol{k}/m$. 在均匀、各向同性系统中电流方向与电场方向一致. $f_0(\boldsymbol{k})$与 $\boldsymbol{k}$ 的方向无关,记为 $f_0(k)$. (6.1.10)式中唯一与角度有关的因子是 $\boldsymbol{v}_k(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}_k)$,其对角度积分的平均值为$\frac{1}{3}v_k^2\boldsymbol{E}$. 电导是 $\boldsymbol{J}$ 与电场 $\boldsymbol{E}$ 之比,我们得到

$$\sigma=-\frac{1}{3}e^2n_0\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}v_k^2\tau_1(\boldsymbol{k})\frac{\partial}{\partial\varepsilon_{\boldsymbol{k}}}f_0(k)\tag{6.1.11}$$

因为$\partial f_0/\partial\varepsilon_{\boldsymbol{k}}$总取负值,所以$\sigma$是一个正量. (6.1.11) 式是计算固体电导的基础. 因为我们并未涉及散射的具体机制, 所以它不仅适用于杂质散射, 也适用于其它机制引起的散射. 应该指出, $\tau_1(\boldsymbol{k})$并不是两次碰撞之间的时间.

假定杂质具有静的球对称势,没有内部自由度,杂质对电子的散射是弹性的,则碰撞积分可写为

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c&=\frac{-[f(\boldsymbol{k})-f_0(k)]}{\tau_1(\boldsymbol{k})}\\&=-2\pi n_i\int\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}'})\{|T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}|^2f(\boldsymbol{k})\\&\qquad\times[1-f(\boldsymbol{k}')]-|T_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}|^2f(\boldsymbol{k}')[1-f(\boldsymbol{k})]\}\end{aligned}\tag{6.1.12}$$

n_i是杂质浓度, $T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}$是从 $\boldsymbol{k}$ 态到 $\boldsymbol{k}'$ 态的散射矩阵元. 由于对称性 $T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}=T_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}$, (6.1.12)式简化为

$$\begin{aligned}\frac{f(\boldsymbol{k})-f_0(k)}{\tau_1(\boldsymbol{k})}&=2\pi n_i\int\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}'})|T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}|^2\\&\qquad\times[f(\boldsymbol{k})-f(\boldsymbol{k}')]\end{aligned}\tag{6.1.13}$$

根据前面的讨论,$f(\boldsymbol{k})$可写为

$$\left.\begin{aligned}f(\boldsymbol{k})&=f_0(k)+\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{E}c(k)\\f(\boldsymbol{k}')&=f_0(k')+\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{E}c(k')\end{aligned}\right\}\tag{6.1.14}$$

因为$|\boldsymbol{k}|=|\boldsymbol{k}'|$,所以$f_0(k')=f_0(k)$,$f(\boldsymbol{k})$与$f(\boldsymbol{k}')$的差别只在于(6.1.14)式右边第二项的角度部分. 取球坐标系,令 z 轴沿 $\boldsymbol{k}$ 方

向，则有

$$\left.\begin{aligned}&\hat{K}\cdot\hat{E}=\cos\theta\\&\hat{K}\cdot\hat{K}'=\cos\theta'\\&\hat{K}'\cdot\hat{E}=\cos\theta\cos\theta'+\sin\theta\sin\theta'\cos\varphi\end{aligned}\right\}\tag{6.1.15}$$

由此得到

$$\begin{aligned}f(\boldsymbol{k})-f(\boldsymbol{k}')=kEc(k)[&\cos\theta(1-\cos\theta')\\&-\sin\theta\sin\theta'\cos\varphi]\end{aligned}\tag{6.1.16}$$

最后一项包含 $\cos\varphi$，对 φ 积分$\int_0^{2\pi}\cos\varphi\mathrm{d}\varphi=0$，剩下的一项为

$$\begin{aligned}\int d\Omega_{k'}[f(\boldsymbol{k})-f(\boldsymbol{k}')]&=kEc(k)\cos\theta\int\mathrm{d}\Omega_{k'}(1-\cos\theta')\\&=[f(\boldsymbol{k})-f_0(k)]\int d\Omega_{k'}(1-\cos\theta')\end{aligned}\tag{6.1.17}$$

由此得到

$$\frac{1}{\tau_1(k)}=2\pi n_i\int\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}\delta(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'})\,|T_{kk'}|^2(1-\cos\theta')\tag{6.1.18}$$

重要的是，此式中被积函数包含因子 $1-\cos\theta'=1-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}'/k^2$，它使 Boltzmann 方程中的弛豫时间 $\tau_1(\boldsymbol{k})$ 不同于两次碰撞之间的时间 $\tau(k)$. $\tau(k)$的公式为

$$\frac{1}{\tau(k)}=2\pi n_i\int\frac{\mathrm{d}^3k'}{(2\pi)^3}\delta(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'})\,|T_{kk'}|^2\tag{6.1.19}$$

因子 $1-\cos\theta'$ 使杂质对电子的散射有不同的权重. $\cos\theta'\approx1$ 的小角度散射对 $\tau_1(\boldsymbol{k})$的贡献很小，因而对电阻的贡献也很小. 大角度散射对电阻的贡献较大. 输运方程中的弛豫时间不等于平均散射率，因为有附加因子对不同的散射事件进行权重.

利用$f_0(k)$的性质可以求出

$$\sigma=\frac{e^2n_0\tau_1(k_{\mathrm{F}})}{m}\tag{6.1.20}$$

其中$n_0=k_F^3/3\pi^2$. 由以上讨论可以看出，杂质引起的电导对温度是不敏感的. 电阻 $\rho=\sigma^{-1}$ 与杂质浓度成正比，这与实验结果是一致的.

§6.2 杂质系统的格林函数

为了用格林函数讨论固体电导,先讨论杂质系统的格林函数. 假定N个电子的系统中有 N_i 个相同的杂质原子，杂质浓度 $n_i=N_i/V$. 杂质原子是无规分布的，但在宏观尺度上固体是均匀的. N_i 个杂质原子对电子的散射是相互独立的,是弹性散射.

假定电子气处于外势场U中,$U_{\alpha\beta}(x)=U_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x},t)_0$ 电子系统的哈密顿量可写为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1 \tag{6.2.1}$$

$\hat{H}_0$ 是自由电子系统的哈密顿量,$\hat{H}_1$ 代表电子与外场的相互作用。$\hat{H}_1$ 可写为

$$\hat{H}_1=\int d^3x\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x})U_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x},t)\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}) \tag{6.2.2}$$

格林函数的一级修正 $G_{\alpha\beta}^1(x,x')$和二级修正 $G_{\alpha\beta}^2(x,x')$是

$$G_{\alpha\beta}^1(x,x')=\int d^4x_1G_{\alpha\gamma_1}^0(x-x_1)U_{\gamma_1\gamma_2}(x_1)G_{\gamma_2\beta}^0(x_1-x')$$

$$G_{\alpha\beta}^2(x,x')=\int d^4x_1d^4x_2G_{\alpha\gamma_1}^0(x-x_1)U_{\gamma_1\gamma_2}(x_1)G_{\gamma_2\gamma_3}^0(x_1-x_2)\cdot U_{\gamma_3\gamma_4}(x_2)G_{\gamma_4\beta}^0(x_2-x')$$

依此类推,可以写出高级修正项的表达式. 应该指出,由于外场的存在,空间和时间的均匀性被破坏，格林函数将分别与x和x'有关,而不再是差 $x-x'$ 的函数. Dyson 方程可以写为

$$G_{\alpha\beta}(x,x')=G_{\alpha\beta}^0(x-x')+\int d^4x_1G_{\alpha\gamma_1}^0(x-x_1)U_{\gamma_1\gamma_2}(x_1)G_{\gamma_2\beta}\cdot(x_1,x') \tag{6.2.3}$$

杂质的势 $U(\boldsymbol{x})$ 是静势，假定 U 与自旋无关，

$$U(\boldsymbol{x})=\sum_j V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)$$

$\boldsymbol{x}$ 是电子坐标，$\boldsymbol{x}_j$ 是杂质原子的坐标．$U(\boldsymbol{x})$ 的傅氏变换是

$$\begin{aligned}U(\boldsymbol{x})&=\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}U(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}\\&=\sum_j\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}V(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)}\\&=\sum_j\int\frac{\mathrm{d}^3pd\omega}{(2\pi)^4}V(\boldsymbol{p})2\pi\delta(\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)-\omega t]}\end{aligned}\tag{6.2.4}$$

可以看出

$$U(\boldsymbol{p})=\sum_j V(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}_j}\tag{6.2.5}$$

或形式地写为

$$U(\boldsymbol{p})=U(\boldsymbol{p},\omega)=\sum_j V(\boldsymbol{p})2\pi\delta(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}_j}$$

现在变换到动量空间．由于 $G_{\alpha\beta}(x,x')$ 不是坐标差的函数，所以傅氏变换定义为

$$G_{\alpha\beta}(x,x')=\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3p'\mathrm{d}\omega}{(2\pi)^4}G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}'-\omega(t-t')]}\tag{6.2.6}$$

将 Dyson 方程变换到动量空间，由于杂质的势和自旋无关，所以下面略去自旋坐标，结果是

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';\omega)=&\,\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')G^0(\boldsymbol{p},\omega)\\&+G^0(\boldsymbol{p},\omega)\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}\sum_j V(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)\cdot\boldsymbol{x}_j}\cdot\\&G(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}';\omega)=\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')G^0(\boldsymbol{p},\omega)\end{aligned}$$

$$+G^0(\boldsymbol{p},\omega)\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)G(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}';\omega)$$

$$=\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')G^0(\boldsymbol{p},\omega)$$

$$+\frac{1}{(2\pi)^3}G^0(\boldsymbol{p},\omega)U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')$$

$$\cdot G^0(\boldsymbol{p}',\omega)+G^0(\boldsymbol{p},\omega)\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^6}U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)$$

$$\cdot G^0(\boldsymbol{p}_1,\omega)U(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')G^0(\boldsymbol{p}',\omega)+\cdots \qquad (6.2.7)$$

一级修正和二级修正的费曼图分别示于图 6.1 和图 6.2 中. $G(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';\omega)$的记法表明,杂质的散射使电子的动量改变，但并不改变其能量.

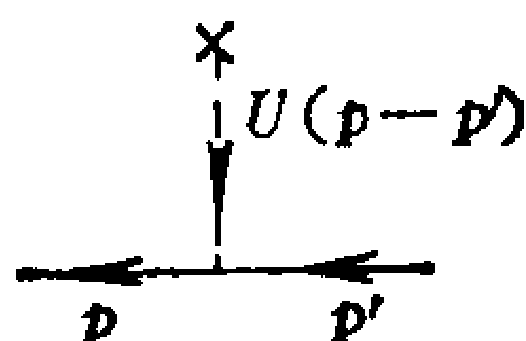


图 6.1

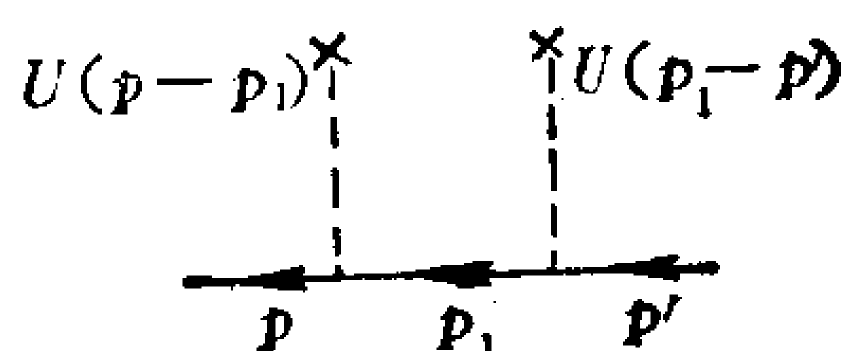


图 6.2

我们已假定杂质是无规分布的. 物理量如电导等的测量是在宏观尺度上进行的，在宏观尺度上杂质分布可以看作是均匀的. 实际测量到的物理量是对包含大量杂质的区域的平均. 因此我们应该求格林函数对杂质的平均. N_i 个杂质原子的坐标记为 $\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$、…、$\boldsymbol{x}_{N_i}$. 格林函数依赖于杂质的坐标,记为

$$G(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots\boldsymbol{x}_{N_i})$$

格林函数 G 对杂质的平均 $\overline{G}$ 定义为

$$\overline{G}=\frac{1}{V^N}\int\mathrm{d}^3x_1\cdots\mathrm{d}^3x_{N_i}G(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_{N_i}) \qquad (6.2.8)$$

$G^0(\boldsymbol{p},\omega)$不依赖于杂质坐标，对杂质的平均只和势 U 有关. 一级修正的平均即是对 U 的平均,我们有

$$\overline{G^1(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';\omega)}=\frac{1}{(2\pi)^3}G^0(\boldsymbol{p},\omega)\overline{U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')}G^0(\boldsymbol{p}',\omega)$$

$\overline{U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')}$ 计算如下

$$\overline{U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')}=\frac{1}{V^N}\int \mathrm{d}^3x_1\cdots\mathrm{d}^3x_{N_i}\sum_j V(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}_j}$$

$$=V(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\frac{N_i}{V}\int \mathrm{d}^3x_j\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}_j}$$

$$=V(0)n_i(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \tag{6.2.9}$$

我们得到

$$\overline{G^1(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';\omega)}=G^0(\boldsymbol{p},\omega)n_iV(0)G^0(\boldsymbol{p},\omega)\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \tag{6.2.10}$$

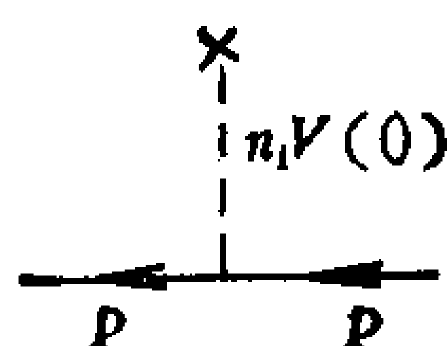


图 6.3

二级修正项的平均值是

$$\overline{G^2(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';\omega)}=G^0(\boldsymbol{p},\omega)\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^6}\overline{U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)U(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')}$$

$$\times G^0(\boldsymbol{p}_1,\omega)G^0(\boldsymbol{p}',\omega)$$

$$\overline{U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)U(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')}$$

$$=V(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)V(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')\overline{\sum_{i,j}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)\cdot\boldsymbol{x}_i-i(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{x}_j}}$$

对 $i=j$，有

$$\overline{\sum_i\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}_i}}=n_i(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \tag{6.2.11}$$

此项的贡献是

$$G^0(\boldsymbol{p},\omega)n_i\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}V(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)V(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p})$$

$$\cdot G^0(\boldsymbol{p}_1,\omega)G^0(\boldsymbol{p},\omega)\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \tag{6.2.12}$$

可表示为图 6. 4. 图中两条虚线由同一“×”发出，

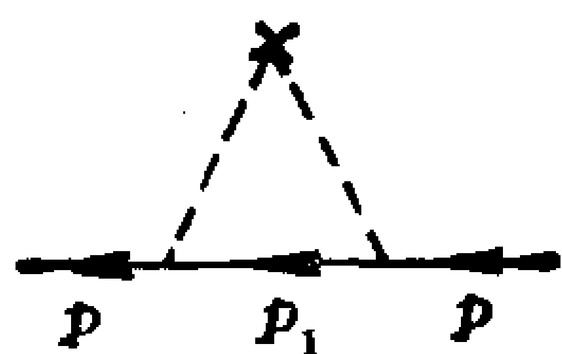


图 6.4

表示电子受到同一原子的散射．若 $i\neq j$，则有

$$\overline{\sum_{i\neq j}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)\cdot\boldsymbol{x}_i-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}_j}}=n_{\mathrm{i}}^2(2\pi)^6\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_1)\delta(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}')$$

由此得到的修正项为

$$G^0(\boldsymbol{p},\omega)n_{\mathrm{i}}V(0)G^0(\boldsymbol{p},\omega)n_{\mathrm{i}}V(0)G^0(\boldsymbol{p},\omega)\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \tag{6.2.13}$$

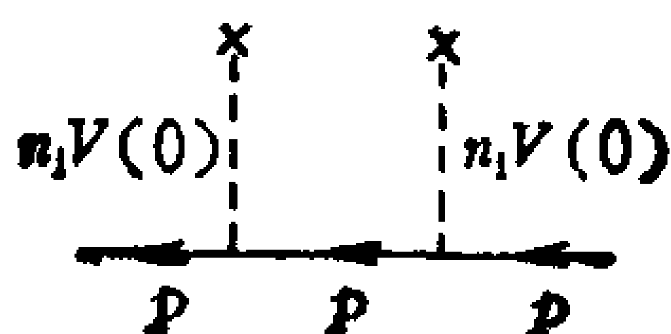


图 6.5

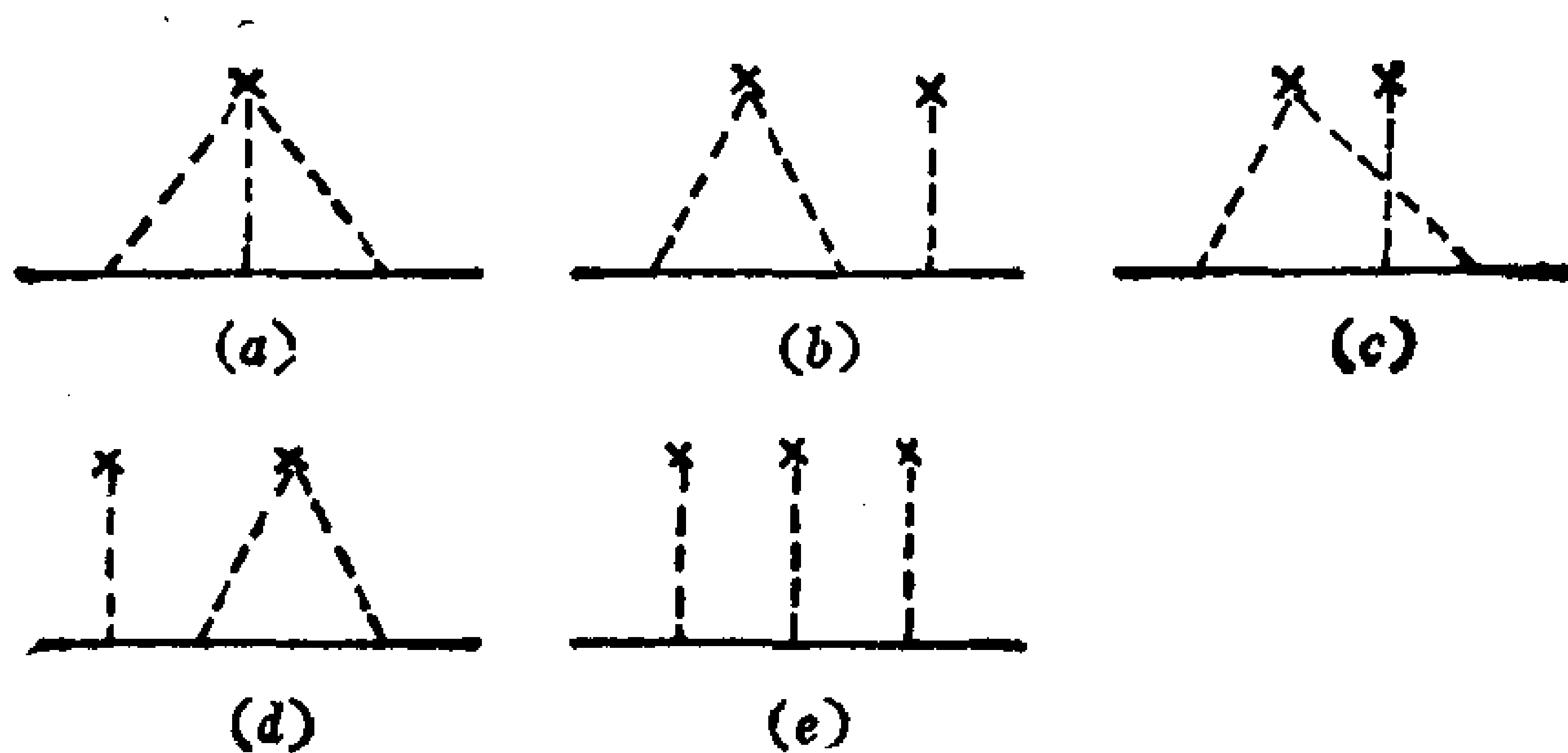


图 6.6

高级修正项也有类似的情况．三级图在平均后会出现图 6-6 中的图．其中 (a) 代表同一原子的三级 Born 散射，(b)、(c)、(d) 代表从原子 $\boldsymbol{x}_i$ 的一级散射和从原子 $\boldsymbol{x}_j$ 的二级 Born 散射，(e) 代表从三个不同原子的 Born 散射．

高级修正项中包括图 6.7 中的图形．杂质对电子的散射是弹

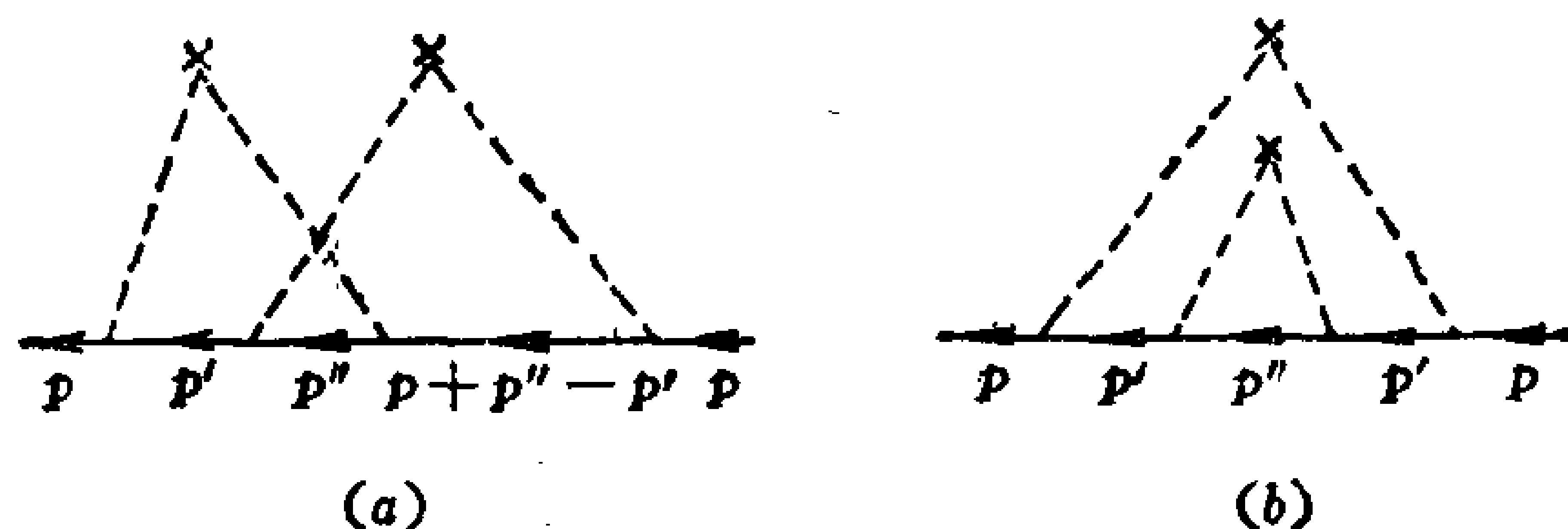


图 6.7

性散射，因而只有费密面附近的电子才受到散射．图 6.7(*a*) 中的动量需满足以下条件

$$|\boldsymbol{p}|\approx|\boldsymbol{p}'|\approx|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}''-\boldsymbol{p}'|\approx|\boldsymbol{p}''|\approx p_{\mathrm{F}}$$

它使动量空间积分的角度受到限制．图 6.7(*a*)比图(*b*) 的贡献小一个因子$(k_{\mathrm{F}}l)^{-1}$．一般情况下可以略去图(*a*)的贡献．

引入不可约自能 Σ，Σ 包括图 6.8 中的图形．其中

$\Sigma=$ + + + + ⋯

图 6.8

第一项的贡献 $n_iV(0)$是一个常数，可并入化学势中．这样，对杂质平均后的 Dyson 方程可写为

$$G(p)=G^0(p)+G^0(p)\frac{n_i}{(2\pi)^3}\int\mathrm{d}^3p'\,|V(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')|^2G(p')G(p) \tag{6.2.14}$$

= +

图 6.9

(6.2.14)式中 $G=\overline{G}$，是对杂质平均后的格林函数，$p=(\boldsymbol{p},\omega)$．对杂质平均后格林函数又恢复了平移不变性，这从各级平均中都出

现 $\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')$ 可以看出.

从(6.2.14)式可以解出

$$G^{-1}(\boldsymbol{p},\omega)=G^{0}(\boldsymbol{p},\omega)^{-1}-n_i\int\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}|V(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')|^2G(\boldsymbol{p}',\omega) \tag{6.2.15}$$

考虑到杂质对电子的散射是弹性散射，不改变电子能量，只使 Bloch 态具有有限寿命，我们可以假设

$$G^{-1}(\boldsymbol{p},\omega)=\omega-\xi_p+\mathrm{i}\Gamma \tag{6.2.16}$$

其中 ξ_p 即前几章中的 ε_p^0. 假定杂质的势是球对称的，与(6.2.15)比较得到

$$\mathrm{i}\Gamma=-\frac{n_imp_{\mathrm{F}}}{(2\pi)^3}\int|V(\theta)|^2\mathrm{d}\Omega\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi'G(\boldsymbol{p}',\omega) \tag{6.2.17}$$

θ 是 $\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'$ 之间的夹角. 完成(6.2.17)式中对 ξ' 的积分. 由于

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\xi'}{\omega-\xi'+\mathrm{i}\Gamma}&=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{[\xi'+(\omega+\mathrm{i}\Gamma)]\mathrm{d}\xi'}{[\xi'-(\omega+\mathrm{i}\Gamma)][\xi'+(\omega+\mathrm{i}\Gamma)]}\\&=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{(\omega+\mathrm{i}\Gamma)\mathrm{d}\xi'}{[\xi'-(\omega+\mathrm{i}\Gamma)][\xi'+(\omega+\mathrm{i}\Gamma)]}\\&=-\pi\mathrm{i}\quad\mathrm{sgn}\Gamma\end{aligned}$$

要注意 ζ' 的奇函数的积分等于零. 因此.

$$\Gamma=\frac{1}{2\tau}\mathrm{sgn}\Gamma \tag{6.2.18}$$

其中

$$\tau^{-1}=\frac{n_imp_F}{(2\pi)^2}\int|V(\theta)|^2\mathrm{d}\Omega=n_iv_{\mathrm{F}}\sigma \tag{6.2.19}$$

τ 是平均碰撞时间，σ 是杂质原子对电子的 Born 近似散射截面. 在 $\mathrm{i}\Gamma$ 的公式(6.2.17)中用 G^0 代替 G，我们得到

$$\Gamma=\frac{1}{2\tau}\mathrm{sgn}\omega \tag{6.2.20}$$

这是 $n_i\to0$ 的结果. (6.2.20)式又可写为

$$\Gamma=\frac{1}{2\tau}\frac{\omega}{|\omega|}$$

因而平均后的格林函数是

$$G(\boldsymbol{p},\omega)=\frac{1}{\omega-\xi_{p}+\frac{\mathrm{i}}{2\tau}\frac{\omega}{|\omega|}} \tag{6.2.21}$$

变换到坐标空间

$$G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\ t-t')\approx\int p\mathrm{d}p\mathrm{d}\omega\sin(p|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t')}$$

$$\times\frac{1}{R\left(\omega-\xi_{p}+\frac{\mathrm{i}\omega}{2\tau|\omega|}\right)}$$

$$\approx\int\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\omega\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\cdot$$

$$\frac{\exp^{\mathrm{i}\left(p_{\mathrm{F}}+\frac{\xi}{v_{\mathrm{F}}}\right)^{R}}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(p_{\mathrm{F}}+\frac{\xi}{v_{\mathrm{F}}}\right)^{R}}}{R\left(\omega-\xi_{p}+\frac{\mathrm{i}}{2\tau}\frac{\omega}{|\omega|}\right)}$$

其中 $R=|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|$. 我们得到

$$G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',t-t')=G^{0}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',t-t')\mathrm{e}^{-|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|/2l} \tag{6.2.22}$$

其中 $l=v_{\mathrm{F}}\tau$ 是电子的平均自由程. 这表明,与纯金属相比, 掺杂金属的单电子格林函数多了一个空间衰减因子. 这是杂质原子对电子的散射引起的,衰减的距离就是平均自由程.

如果杂质原子对电子的散射很弱, 则可以忽略同一原子上的多重散射效应. 若散射并不弱,但杂质原子的浓度很小,则可以近似地只考虑同一杂质原子的多重散射, 即只考虑图 6.10 的贡献,

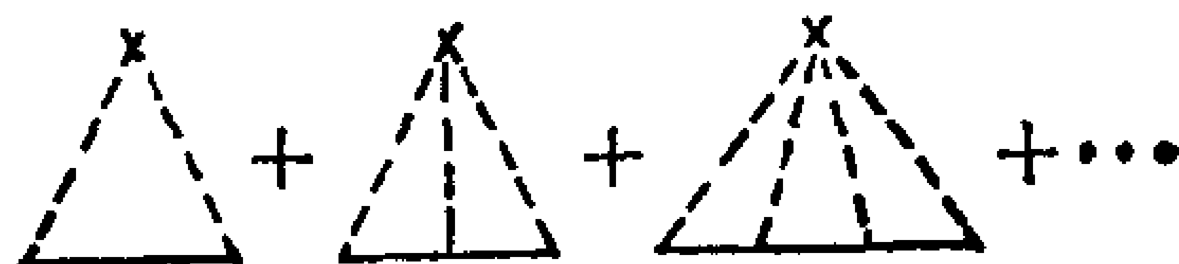


图 6.10

可以证明，这时自能可以写为

$$\Sigma(\boldsymbol{p},\omega)=n_i T_{pp}(\omega) \tag{6.2.23}$$

其中

$$T_{pp'}(\omega)=V_{pp'}+\int\frac{d^3p''}{(2\pi)^3}\frac{V_{pp''}T_{p''p'}(\omega)}{\omega-\xi_{p''}+i\delta} \tag{6.2.24}$$

是依赖于能量的 T 矩阵，即量子力学势散射理论中的 T 矩阵，(6.2.24)式是 T 矩阵的积分方程.

§6.3 电导的线性响应理论

在量子多体理论建立以前，电导理论的基础是 Boltzmann 方程. 1957 年 Kubo 在量子统计的基础上提出了电导的线性响应理论. 本节介绍 Kubo 理论的基本内容.

假定外场比较弱，电场 $\boldsymbol{E}$ 随时间、空间的变化是

$$E_\alpha(\boldsymbol{r},t)=E_\alpha^0 e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \tag{6.3.1}$$

其中 α 代表坐标分量. 欧姆定律可写为

$$\begin{aligned} J_\alpha(\boldsymbol{r},t)&=\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega)E_\beta(\boldsymbol{r},t)\\ \sigma_{\alpha\beta}&=\mathrm{Re}\sigma_{\alpha\beta}+\mathrm{iIm}\sigma_{\alpha\beta}\end{aligned} \tag{6.3.2}$$

$\sigma_{\alpha\beta}$ 是电导，重复的符号表示求和. (6.3.1) 式中的电场是交变的，因而电流也是交变的. 对(6.3.2)式第一式进行变换可以得到

$$J_\alpha(\boldsymbol{r},t)=\int d^3r'\int_{-\infty}^{t}dt'\,\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}',t-t')E_\beta(\boldsymbol{r}',t') \tag{6.3.3}$$

这个公式表明，$\boldsymbol{r}$ 处的电流与 $\boldsymbol{r}'$ 处的场的关系只依赖于 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$. 这个假定在原子尺度上是不正确的，普遍的公式应该是 $\sigma(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';t-t')$ 即分别与 $\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{r}'$ 有关. 对固体，(6.3.3)式可看作对很多原胞平均的结果. 直流电导是 $\boldsymbol{q}\to 0$, $\omega\to 0$ 时的极限，并且是实数. (6.3.1)式中假定扰动具有单一频率 ω, $\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega)$ 是对这个单一频率的

响应．这个假定不会使我们推出的公式受到限制，因为响应是线性的，不同频率的扰动相互独立，将不同频率的响应相加就可得到总电流．

量子力学中总电流算符是

$$
\begin{aligned}
\hat{J}_t(\boldsymbol{r},t) &= \frac{e}{2m}\sum_i \left\{\left[\hat{p}_i - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i,t)\right]\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\right. \\
&\quad \left. +\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\left[\hat{p}_i - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i,t)\right]\right\} \\
&= \hat{j}(r) - \frac{n_0 e^2}{mc}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \qquad (6.3.4)
\end{aligned}
$$

其中 n_0 是电子密度．$\hat{j}(r)$的二次量子化形式是

$$
\begin{aligned}
\hat{j}(\boldsymbol{r}) &= \frac{e}{m}\sum_{p,q} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} c^+_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}} c_{\boldsymbol{p}}\left(\boldsymbol{p}+\frac{1}{2}\boldsymbol{q}\right) \\
&= \sum_{q} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{j}(\boldsymbol{q}) \qquad (6.3.5) \\
\hat{j}(\boldsymbol{q}) &= \frac{e}{m}\sum_{p}\left(\boldsymbol{p}+\frac{1}{2}\boldsymbol{q}\right)c^+_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}} c_{\boldsymbol{p}}
\end{aligned}
$$

系统的哈密顿量是

$$
\hat{H}_t = \hat{H} + \hat{H}_1 \qquad (6.3.6)
$$

$\hat{H}_1$ 包括总电场与系统中粒子的相互作用．

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_1 &= -\frac{1}{c}\int \mathrm{d}^3 r\, j_\alpha(\boldsymbol{r}) A_\alpha(\boldsymbol{r},t) \\
\frac{1}{c}A_\alpha(\boldsymbol{r},t) &= -\frac{\mathrm{i}}{\omega}E_\alpha(\boldsymbol{r},t)
\end{aligned} \qquad (6.3.7)
$$

我们取 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 的规范．哈密顿量中的 $\hat{H}$ 包括电子-电子、电子-声子、电子-杂质等相互作用．本章讨论有杂质时的电导．利用电场的公式，$\hat{H}_1$ 可以写为

$$
\hat{H}_1 = -\int \mathrm{d}^3 r\, j_\alpha(\boldsymbol{r})\left(\frac{-\mathrm{i}}{\omega}\right)E_\alpha(\boldsymbol{r},t)
$$

$$=\frac{\mathrm{i}}{\omega}\int \mathrm{d}^3 r j_\alpha(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} E_\alpha^0$$

$$=\frac{\mathrm{i}}{\omega} j_\alpha(\boldsymbol{q}) E_\alpha^0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{6.3.8}$$

先讨论 $T=0\mathrm{K}$ 时的情况. 需要求出电流算符对基态的平均值. 由(6.3.4)式和(6.3.7)式得到

$$\langle \hat{J}_t(\boldsymbol{r},t)\rangle = \langle \hat{J}(\boldsymbol{r},t)\rangle + \mathrm{i}\frac{n_0 e^2}{m\omega}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \hat{j}^{(1)} + \hat{j}^{(2)} \tag{6.3.9}$$

$$\begin{aligned} \hat{j}^{(1)} &= \mathrm{i}\,\frac{n_0 e^2}{m\omega}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) \\ \hat{j}^{(2)} &= \langle \hat{J}(\boldsymbol{r},t)\rangle \end{aligned} \tag{6.3.10}$$

$\langle\cdots\rangle$表示对基态平均. 在 Heisenberg 绘景中

$$\hat{J}_\alpha^{(2)} = \langle \Psi_0 | \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\hat{H}+\hat{H}_1)t} \hat{J}_\alpha(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat{H}+\hat{H}_1)t} | \Psi_0\rangle \tag{6.3.11}$$

现在变换到相互作用绘景. 根据第一章的讨论

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\hat{H}+\hat{H}_1)t} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\hat{U}(t) \tag{6.3.12}$$

其中 $\hat{U}(t)$即(1.2.13)中的 $\hat{U}(t,0)$, (6.3.12)中的$\hat{H}+\hat{H}_1$ 和 $\hat{H}$ 分别对应于(1.2.13)中的 $\hat{H}$ 和 $\hat{H}_0$. 注意到基态无电流,即

$$\langle \Phi | \hat{J}_\alpha(\boldsymbol{r},t) | \Phi\rangle = 0$$

用§1-7 中线性响应的方法可以求出

$$J_\alpha^{(2)}(\boldsymbol{r},t) = -\mathrm{i}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \langle \Phi | [\hat{J}_\alpha(\boldsymbol{r},t), \hat{H}_1(t')] | \Phi\rangle \tag{6.3.13}$$

$|\Phi\rangle$是 $\hat{H}_1=0$ 时系统的基态. 我们的目的是推导欧姆定律, 因此需要把电场移到积分号外. 由(6.3.1)式和(6.3.7)式有

$$\begin{aligned} [\hat{J}_\alpha(\boldsymbol{r},t), \hat{H}_1(t')] &= \frac{\mathrm{i}}{\omega} E_\beta^0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t'} [\hat{J}_\alpha(\boldsymbol{r},t), \hat{J}_\beta(\boldsymbol{q},t')] \\ &= \frac{\mathrm{i}}{\omega} E_\beta(\boldsymbol{r},t) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')} \\ &\quad \cdot [\hat{J}_\alpha(\boldsymbol{r},t), \hat{J}_\beta(\boldsymbol{q},t')] \end{aligned}$$

整理后得到

$$J_{\alpha}^{(2)}(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\omega}E_{\beta}(\boldsymbol{r},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\langle\Phi|[\hat{J}_{\alpha}(\boldsymbol{r},t),\hat{J}_{\beta}(\boldsymbol{q},t')]|\Phi\rangle \tag{6.3.14}$$

此式与欧姆定律有相同的形式，电流 $J_{\alpha}^{(2)}$ 与电场成正比．由此可以求出电导为

$$\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{1}{\omega}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\langle\Phi|[\hat{J}_{\alpha}(\boldsymbol{r},t),\hat{J}_{\beta}(\boldsymbol{q},t')]|\Phi\rangle+\mathrm{i}\frac{n_0e^2}{m\omega}\delta_{\alpha\beta} \tag{6.3.15}$$

现在对空间变量 $\boldsymbol{r}$ 进行平均，以消去原子尺度的扰动．这个平均即对 $\boldsymbol{r}$ 积分后除以体积 V，我们有

$$\frac{1}{V}\int\mathrm{d}^3r\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{J}_{\alpha}(\boldsymbol{r},t)=J_{\alpha}(-\boldsymbol{q},t)=J_{\alpha}^{+}(\boldsymbol{q},t) \tag{6.3.16}$$

这样，我们得到

$$\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{1}{\omega}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\langle\Phi|[\hat{J}_{\alpha}^{+}(\boldsymbol{q},t),\hat{J}_{\beta}(\boldsymbol{q},t')]|\Phi\rangle+\mathrm{i}\frac{n_0e^2}{m\omega}\delta_{\alpha\beta} \tag{6.3.17}$$

这就是电导的 Kubo 公式．(6.3.17) 式中的相关函数只依赖于时间差 $(t-t')$，作变换 $t-t'\to t$，我们有

$$\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{1}{\omega}\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\langle\Phi|[\hat{J}_{\alpha}^{+}(\boldsymbol{q},t),\hat{J}_{\beta}(\boldsymbol{q},0)]|\Phi\rangle+\mathrm{i}\frac{n_0e^2}{m\omega}\delta_{\alpha\beta} \tag{6.3.18}$$

$\sigma_{\alpha\beta}$ 不包含电场或矢势，电导是系统基态固有的特性．定义电流算符的推迟函数为

$$\Pi_{\alpha\beta}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},t-t')=-\mathrm{i}\theta(t-t')\langle\Phi|[\hat{J}_{\alpha}^{+}(\boldsymbol{q},t),\hat{J}_{\beta}(\boldsymbol{q},t')]|\Phi\rangle \tag{6.3.19}$$

其傅氏变换为

$$\Pi^{R}_{\alpha\beta}(q,\omega)=-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\theta(t-t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\langle\Phi|[\hat{J}^{+}_{\alpha}(q,t),\hat{J}_{\beta}(q,t')]|\Phi\rangle \tag{6.3.20}$$

与 Kubo 公式比较得到

$$\sigma_{\alpha\beta}(q,\omega)=\frac{\mathrm{i}}{\omega}\left[\Pi^{R}_{\alpha\beta}(q,\omega)+\frac{n_0e^2}{m}\delta_{\alpha\beta}\right] \tag{6.3.21}$$

$\Pi_{\alpha\beta}(q,\omega)$称为电流-电流相关函数.

以上方法可推广到 $T>0$，这时需要对有关的量求统计平均. 计算结果可用 $T>0$ 时的电流-电流相关函数 $\Pi^{TR}_{\alpha\beta}(q,\omega)$表示，并可用松原函数计算. 定义

$$\Pi_{\alpha\beta}(q,\tau)=-\langle T_{\tau}[\hat{J}^{+}_{\alpha}(q,\tau)\hat{J}_{\beta}(q,0)]\rangle \tag{6.3.22}$$

$$\Pi_{\alpha\beta}(q,i\omega)=\int_{0}^{\beta}d\tau e^{i\omega\tau}\Pi_{\alpha\beta}(q,\tau) \tag{6.3.23}$$

“时间”变量 τ 和频率“$\mathrm{i}\omega$”表示，$\Pi_{\alpha\beta}(q,\tau)$、$\Pi_{\alpha\beta}(q,i\omega)$ 是 $T>0$ 时的相关函数. 从上半平面将 $\Pi_{\alpha\beta}(q,i\omega)$解析延拓到实轴上面，即取 $\mathrm{i}\omega\to\omega+\mathrm{i}\delta$，就可得到推迟相关函数 $\Pi^{TR}_{\alpha\beta}(q,\omega)$，$TR$ 表示 $T>0$ 时的推迟相关函数.

$$\Pi_{\alpha\beta}(q,\mathrm{i}\omega)=\Pi^{TR}_{\alpha\beta}(q,\omega) \tag{6.3.24}$$

$$\mathrm{i}\omega\to\omega+i\delta$$

这样就可得到 $T>0$ 时的电导公式.

先取极限 $q\to0$，然后取极限 $\omega\to0$，即可得到直流电导. 取极限的顺序是很重要的. 先取 $q\to0$ 的极限则有

$$\left.\begin{aligned}&\lim_{q\to0}\hat{J}^{+}_{\alpha}(q,\tau)=\hat{J}_{\alpha}(\tau)\\&\lim_{q\to0}\Pi_{\alpha\beta}(q,i\omega)=\Pi_{\alpha\beta}(i\omega)\\&\lim_{q\to0}\Pi^{TR}_{\alpha\beta}(q,\omega)=\Pi^{TR}_{\alpha\beta}(\omega)\\&\lim_{q\to0}\sigma_{\alpha\beta}(q,\omega)=\sigma_{\alpha\beta}(\omega)\end{aligned}\right\} \tag{6.3.25}$$

研究直流电导时，在计算的开始即可取极限 $q\to 0$，这可使推导大大简化．然后取极限 $\omega\to 0$．因为直流电导是实数，故有

$$\mathrm{Re}\sigma_{\alpha\beta}=-\lim_{\omega\to 0}\frac{1}{\omega}\mathrm{Im}[\Pi^{\mathrm{TR}}_{\alpha\beta}(\omega)] \tag{6.3.26}$$

上式右方含有推迟相关函数的虚数部分．可以证明，$\omega\to 0$ 的极限过程并不引起发散．在 Kubo 公式中为了求直流电导，需要先计算交流 电导，然后取极限 $\omega\to 0$．若开始 就从直流电场出发则计算要麻烦一些．

§6.4　Kubo 公式的近似解

本节讨论有杂质时电 子系统的电导．只讨论 $T>0$ 的情况故略去§6-3 中电流相关函数的标记"T"．对各向同性固体材料；可只研究下面的相关函数

$$\Pi(\mathrm{i}\omega)=-\frac{1}{3V}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\langle T_\tau[\hat{J}(\tau)\cdot\hat{J}(0)]\rangle \tag{6.4.1}$$

令 $\mathrm{i}\omega\to\omega+\mathrm{i}\delta$ 就可得到推迟函数 $\Pi^{\mathrm{R}}(\omega)$．直流电导由取极限 $\omega\to 0$ 得到

$$\sigma=-\lim_{\omega\to 0}\left[\frac{\mathrm{Im}\Pi^{\mathrm{R}}(\omega)}{\omega}\right] \tag{6.4.2}$$

假定杂质是无规分布的，并略去电子之间的库仑相互作用，则系统的哈密顿量是

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}}c^+_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}\sigma}+\hat{H}_1\\ \hat{H}_1&=\frac{1}{V}\sum_{q}V(q)\rho_i(q)\rho(q)\end{aligned} \tag{6.4.3}$$

$$\rho_i(q)=\sum_j e^{iq\cdot x_j} \tag{6.4.4}$$

其中 $\boldsymbol{x}_j$ 是杂质原子的坐标．实际观察到的结果是对包含大量杂

质的区域的平均，因此我们的结果应该对杂质原子的分布进行平均．平均的方法已在§6-2 中介绍过．

相互作用绘景中，相关函数 $\Pi(\mathrm{i}\omega)$ 是

$$\Pi(\mathrm{i}\omega)=-\frac{1}{3V}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\langle T_\tau[S(\beta)\mathrm{e}^{\hat{H}_0\tau}\boldsymbol{J}\mathrm{e}^{-\hat{H}_0\tau}\cdot\boldsymbol{J}]\rangle \quad (6.4.5)$$

S 是电子系统与杂质相互作用的 S 矩阵．将 S 矩阵展开，用Wick定理可求出(6.4.5)式的微扰级数．本节只讨论直流电导，所以 $\boldsymbol{q}=0$． $S=1$ 的项记为 Π_0，

$$\begin{aligned}\Pi_0(\mathrm{i}\omega)&=\frac{-e^2}{3m^2V}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}'\langle T_\tau c_{\boldsymbol{p}\sigma}^+(\tau)c_{\boldsymbol{p}\sigma}(\tau)c_{\boldsymbol{p}'\sigma'}^+c_{\boldsymbol{p}'\sigma'}\rangle\\&=+\frac{2e^2}{3m^2V}\sum_{\boldsymbol{p}}p^2\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p},\tau)\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p},-\tau)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\end{aligned} \quad (6.4.6)$$

$\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p},\tau)$、$\mathscr{G}^0(\boldsymbol{p},-\tau)$是自由电子松原函数．(6.4.6)式可用图6-11 表示．因为$\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}=\beta\delta_{\omega=0}$，只当 $\mathrm{i}\omega=0$ 时 $\Pi_0(\mathrm{i}\omega)$ 才不等于零，因而电导等于无穷．这并不奇怪，因为 Π_0 是自由粒子的相关函数，其电阻应该等于零．为了得到有限电阻，必需考虑粒子的阻尼．

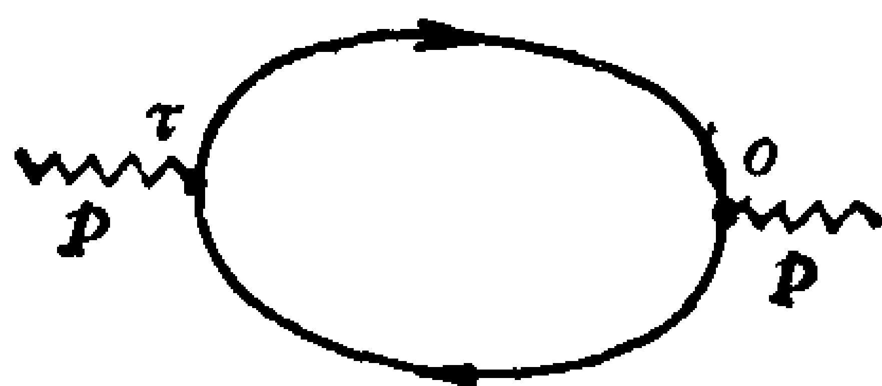
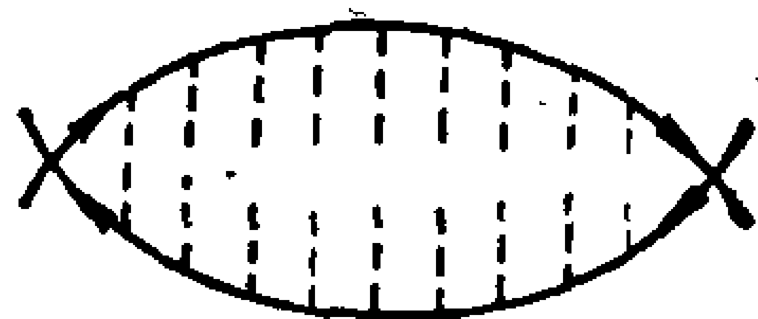


图 6.11


图 6.12

若将(6.4.5)式中的 S 矩阵展开，则我们得到电子受杂质散射的图形，如图 6-12 所示．其中的虚线与图6-1中的虚线意义相同．它可以解释为在 $\tau=0$ 时激发了一个电子-空穴对，在时间 τ 消失，电子和空穴在传播过程中受到杂质的散射．对杂质系统平均，就是把相应于一个原子散射的一对(或更高次幂的) 虚线联结起来．

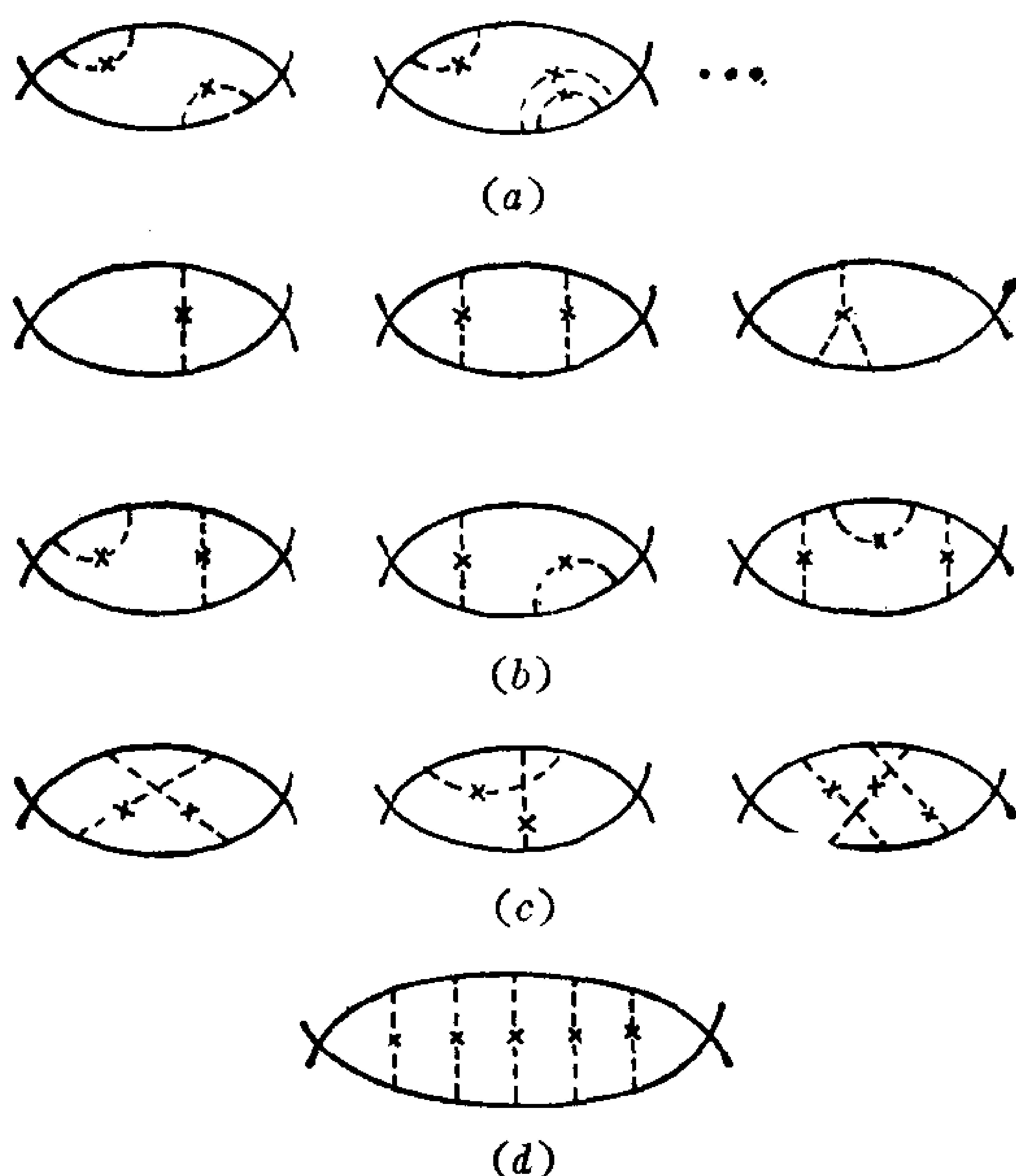


图 6.13

这时会出现两类图形，一类如图 6.13(*a*)所示，杂质的效应可以通过两个修正后的单粒子松原函数的乘积$\mathscr{G}\mathscr{G}$计入．另一类如图6.13(*b*)、(*c*)所示，它们表示散射关联效应，不能以$\mathscr{G}\mathscr{G}$的形式表示．(*b*) 中杂质虚线没 有 交叉，图 (*c*) 中虚 线 有交叉，如 果准确到 $(k_F l)^{-1}$ 的数量级，则可以忽略所有虚线有交叉的图形．图(*b*)中还包括受同一原子多次散射的图形．若只考虑从不同原子的多次散射，则有图 6-13(*d*)．

下一步近似我们用$\mathscr{G}$代替 $\mathscr{G}^0$．$\mathscr{G}$ 包括杂质散 射引起的电子自能，是图 6.13(*a*) 各种图形求和的结果．这样，我们就考虑了粒子的阻尼．将此近似记为 $\Pi^0(\mathrm{i}\omega)$，则有

$$\Pi^0(\mathrm{i}\omega)=+\frac{2e^2}{3m^2V}\sum_{\boldsymbol{p}}p^2\frac{1}{\beta}\sum_{\mathrm{i}p_n}\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p_n+\mathrm{i}\omega)\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p_n) \tag{6.4.7}$$

可表示为图 6.14，图中实线代表 $\mathscr{G}$. 图中的顶角带有矢量 $\boldsymbol{p}$，因此也称为矢量顶角. 我们先对其中的频率求和，记

$$S=\frac{1}{\beta}\sum_{\mathrm{i}p}\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)$$

$$=\frac{1}{\beta}\sum_{\mathrm{i}p}\frac{1}{\mathrm{i}p-\xi_p-\Sigma(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p)}\cdot\frac{1}{\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega-\xi_p-\Sigma(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)} \tag{6.4.8}$$

式中 $\xi_p=\frac{p^2}{2m}-\mu$. 这个求和可用回路积分作出. 回路积分是

$$\int\frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}}n_{\mathrm{F}}(z)\mathscr{G}(\boldsymbol{p},z)\mathscr{G}(\boldsymbol{p},z+\mathrm{i}\omega)$$

$z=\varepsilon$ 和 $z=\varepsilon-\mathrm{i}\omega$ 两条线是被积函数的割线. 积分回路如图 6.15 所示. 图中的"×"表示 $z=(2n+1)\pi\mathrm{i}/\beta$，是被积函数的极点. 求和等于沿着割线积分，这样就得到

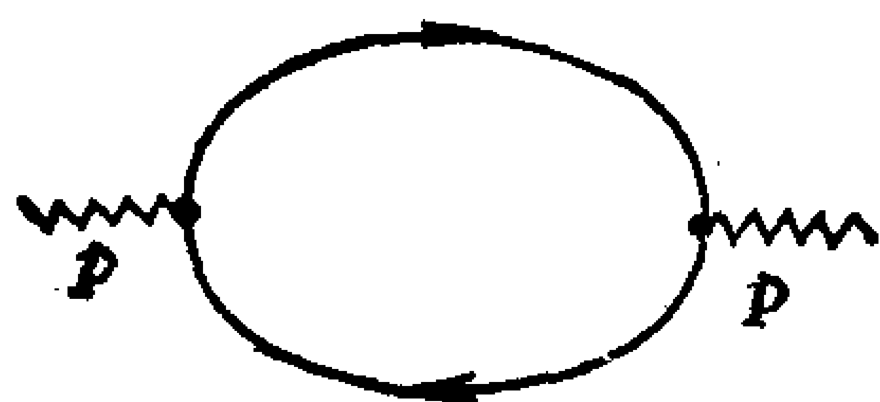


图 6.14

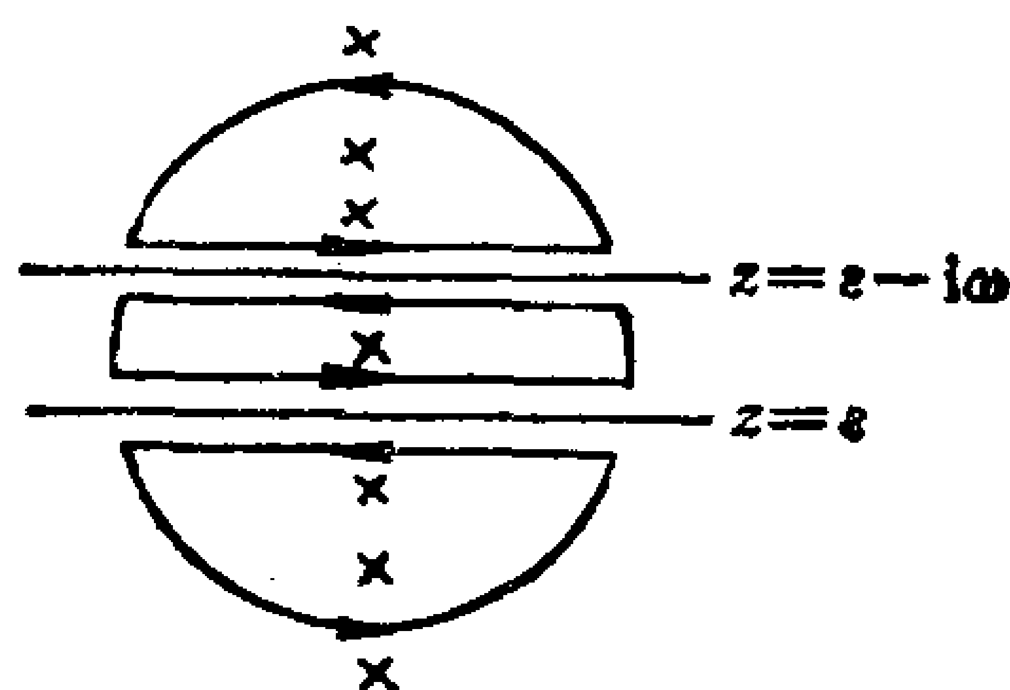


图 6.15

$$S=-\int_{-\infty}^{\infty}n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)\{\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon+\mathrm{i}\omega)[\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon+\mathrm{i}\delta)-\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon-\mathrm{i}\delta)]$$
$$+\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon-\mathrm{i}\omega)[\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon+\mathrm{i}\delta)-\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon-\mathrm{i}\delta)]\}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi i}$$

其中

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon+\mathrm{i}\delta)-\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon-i\delta)=G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p},\varepsilon)-G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{p},\varepsilon)$$
$$=2\mathrm{i}\mathrm{Im}[G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p},\varepsilon)]$$
$$=-\mathrm{i}A(\boldsymbol{p},\varepsilon)$$

正是推迟格林函数的谱函数. 这样, S 可写为

$$S=+\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)A(\boldsymbol{p},\varepsilon)[\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon+\mathrm{i}\omega)+\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon-\mathrm{i}\omega)] \tag{6.4.9}$$

由此得到

$$\Pi^{0}(\mathrm{i}\omega)=\frac{2e^{2}}{3m^{2}V}\sum_{\boldsymbol{p}}P^{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)A(\boldsymbol{p},\varepsilon)\times[\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon+\mathrm{i}\omega)+\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon-\mathrm{i}\omega)] \tag{6.4.10}$$

现在可以进行解析延拓, 令 $\mathrm{i}\omega\to\omega+\mathrm{i}\delta$. 解析延拓使$\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon\pm\mathrm{i}\omega)$ 变为$G(\boldsymbol{p},\varepsilon\pm\omega\pm\mathrm{i}\delta)$. 然后取(6.4.10)的虚数部分. 因为

$$\mathrm{Im}[G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p},\varepsilon+\omega)+G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{p},\varepsilon-\omega)]=-\frac{1}{2}[A(\boldsymbol{p},\varepsilon+\omega)-A(\boldsymbol{p},\varepsilon-\omega)] \tag{6.4.11}$$

所以有

$$\mathrm{Im}[\Pi^{\mathrm{R}0}(\omega)]=-\frac{e^{2}}{3m^{2}V}\sum_{\boldsymbol{p}}p^{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)A(\boldsymbol{p},\varepsilon)\times[A(\boldsymbol{p},\varepsilon+\omega)-A(\boldsymbol{p},\varepsilon-\omega)] \tag{6.4.12}$$

在第二项中作变换 $\varepsilon\to\varepsilon+\omega$, 得到

$$\mathrm{Im}[\Pi^{\mathrm{R}0}(\omega)]=-\frac{e^{2}}{3m^{2}V}\sum_{\boldsymbol{p}}p^{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}A(\boldsymbol{p},\varepsilon)A(\boldsymbol{p},\varepsilon+\omega)\times[n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)-n_{\mathrm{F}}(\varepsilon+\omega)] \tag{6.4.13}$$

将此式除 ω 后取极限 $\omega\to0$. 与频率有关的因子是

$$\lim_{\omega\to0}\frac{1}{\omega}[n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)-n_{\mathrm{F}}(\varepsilon+\omega)]=-\frac{\partial}{\partial\varepsilon}n_{\mathrm{F}}(\varepsilon) \tag{6.4.14}$$

这样, 我们求得电导σ^{0}为

$$\sigma^{0}=-\frac{e^{2}}{3m^{2}}\int\frac{\mathrm{d}^{3}p}{(2\pi)^{3}}p^{2}\int\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}[A(\boldsymbol{p},\varepsilon)]^{2}\left[\frac{\partial}{\partial\varepsilon}n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)\right] \tag{6.4.15}$$

因为 $\partial n_{\mathrm{F}}/\partial\varepsilon$ 小于零, 所以(6.4.15)式右方是正值.

σ^{0} 的公式有几个重要的特点. $T=0\mathrm{K}$ 时$\dfrac{\partial n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}=-\delta(\varepsilon)$,

因而可以消去对 ε 的积分. 其次, σ^0含有因子$[A(\boldsymbol{p},\varepsilon)]^2$, 研究杂质浓度很小时的极限可以看出这个因子的重要性. 因为自能与n_i成正比, 所以 $n_i\to 0$ 时$\Sigma\to 0$. 定义 $\Delta=-\mathrm{Im}\Sigma$, 则有

$$\lim_{n_i\to 0} A(\boldsymbol{p},\varepsilon)=\lim_{\Delta\to 0}\frac{2\Delta}{[\varepsilon-\xi_p-\mathrm{Re}\Sigma]^2+\Delta^2}=2\pi\delta(\varepsilon-\xi_p) \quad (6.4.16)$$

即 $n_i\to 0$ 时谱函数变为 δ 函数. 这个极限行为是合理的, 没有杂质时粒子是自由的, 其谱函数是 δ 函数. 现在研究 $n_i\to 0$ 时 A^2 的行为. 为此考虑下面的积分

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{2\pi}\ \frac{2\Delta}{x^2+\Delta^2}=1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{2\pi}\left(\frac{2\Delta}{x^2+\Delta^2}\right)^2=\frac{1}{\Delta} \quad (6.4.17)$$

其中 $x=\varepsilon-\xi_p-\mathrm{Re}\Sigma$. 第一个积分与 (6.4.16) 一致. 第二个积分表明, 我们可以作下面的代替

$$A^2=\lim_{\Delta\to 0}\left(\frac{2\Delta}{x^2+\Delta^2}\right)^2=\lim_{\Delta\to 0}\frac{2\pi\delta(x)}{\Delta} \quad (6.4.18)$$

注意到在费密面附近

$$\Delta(p_{\mathrm{F}},\varepsilon=0)=\frac{1}{2\tau(p_{\mathrm{F}})}=-\mathrm{Im}\Sigma \quad (6.4.19)$$

这样, 我们得到的电导公式为

$$\sigma^0=\frac{2e^2}{3m^2}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}\delta(\xi_p)\,p^2\tau(p) \quad (6.4.20)$$

这个方程似乎是σ的正确答案, 因为它与(6.1.11)有相似的形式. 但(6.4.20)式与 Boltzmann 方程的结果有重要的差别. (6.4.20)式中有弛豫时间但无因子 $1-\cos\theta'$, 这是一个严重的缺点. (6.4.20)是 σ 中的一项, σ^0中的松原函数包含了所有的自能效应, 下一步近似要考虑顶角修正. 顶角修正的图前面已经介绍过了. 图 6-13(d)就是顶角修正的例子. 图 6-16 表示某些类型的顶角修正. 图(a) 中只有同一个原子参与散射. 顶角图也可由几个原子参与

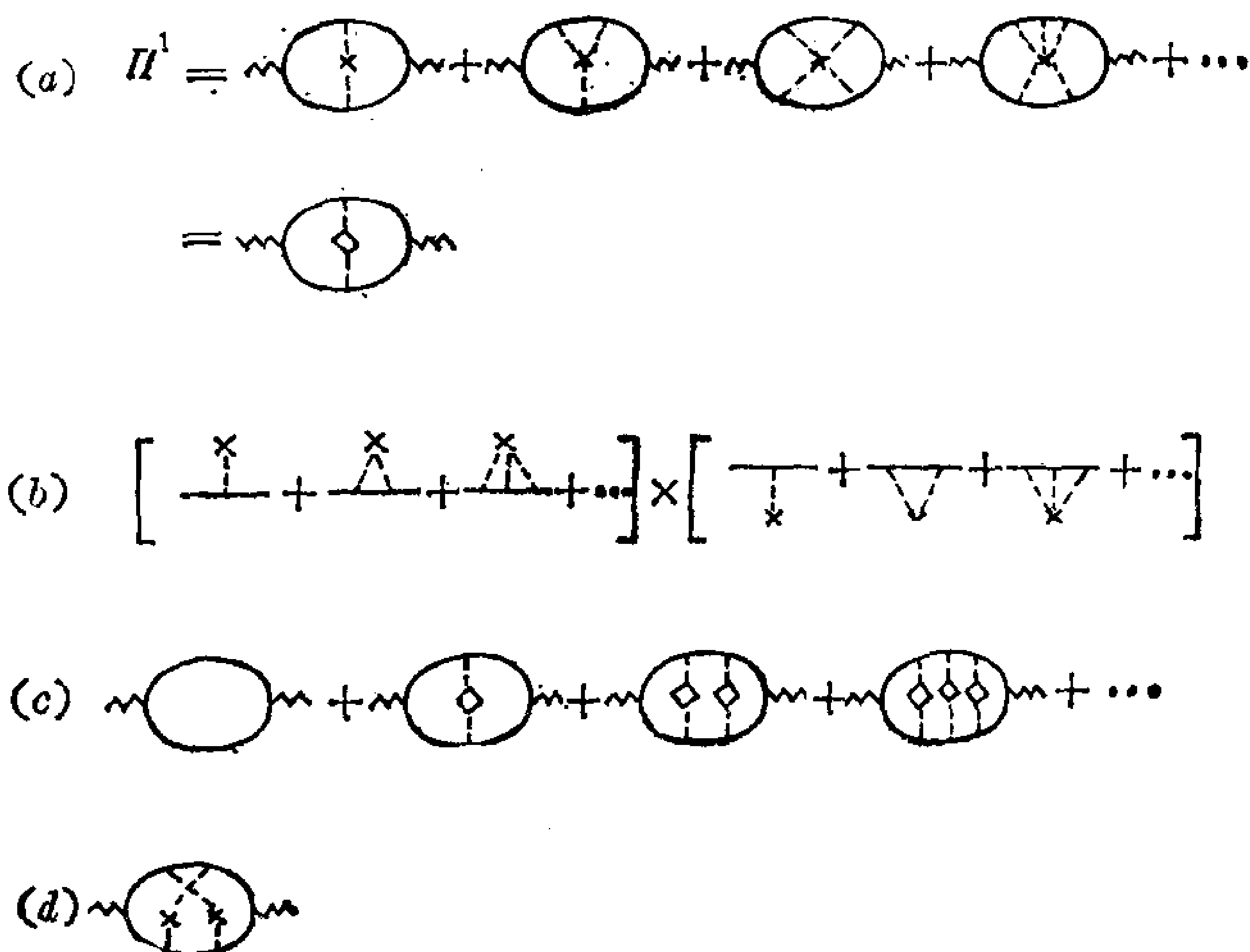


图 6.16

散射而引起. 图6-15(a)的图形求和是

$$\Pi^1=\frac{2e^2}{V^2 3m^2}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'}\frac{1}{\beta}\sum_{\mathrm{i}p}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}'\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)$$

$$\times\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)\times n_i T_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\mathrm{i}p)T_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}}(\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)\quad(6.4.21)$$

我们注意到,杂质散射过程中总动量守恒而粒子的能量保持不变. (6.4.21)式推导如下. 注意到图(b), 则图(a)的下面的电子线可写为

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\ \mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\ \mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)\Big[V_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}+\int\frac{\mathrm{d}^3p_1}{(2\pi)^3}V_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}_1}V_{\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}'}$$

$$\times\mathscr{G}(\boldsymbol{p}_1,\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)+\int'\frac{\mathrm{d}^3p_1\mathrm{d}^3p_2}{(2\pi)^6}V_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}_1}\mathscr{G}(\boldsymbol{p}_1,\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)V_{\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_2}$$

$$\times\mathscr{G}(\boldsymbol{p}_2,\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)V_{\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}'}+\cdots\Big]$$

$$=\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)T_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)\quad(6.4.22)$$

与(6.2.24)式比较可以看出, 方括弧中的部分正是T矩阵的表达式,但用$\mathscr{G}$代替了T矩阵中的$\mathscr{G}^0$. 在下面的计算中仍取$\mathscr{G}=\mathscr{G}^0$,

则与 T 矩阵完全相同. 上面的线可用相同的方法求出，但它是从 $\boldsymbol{p}'$ 到 $\boldsymbol{p}$，能量是 $\mathrm{i}p$. 其表示式为

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p)T_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}}(\mathrm{i}p)$$

两项的乘积给出(6.4.21).

图 6.16 (a)的级数和可用一个菱形表示如下

$$\Diamond = n_i T_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\mathrm{i}p)T_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}}(\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega) \equiv W^{(1)}_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\mathrm{i}p,\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega) \quad (6.4.23)$$

菱形表示单个杂质散射产生的总的顶角，用 $W^{(1)}_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\mathrm{i}p,\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)$ 表示. 图 6.16(c)表示相关函数的求和，从左到右菱形的数目不断增加，对它们求和可以得到权重因子$(1-\cos\theta')$. 应该指出，对不同杂质的散射图(c)并不是唯一的贡献，还有图(d)那样的非阶梯图，阶梯图求和忽略了这些项，$n_i\to 0$ 时这些项贡献很小.

阶梯图的头两项已经求出，就是 Π^0 和Π'. 图 6.16(c) 的和记为 $\Pi^{(\mathrm{L})}$，有

$$\Pi^{(\mathrm{L})}(\mathrm{i}\omega)=\frac{2e^2}{3m^2V}\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{1}{\beta}\sum_{\mathrm{i}p}\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)$$

$$\times\boldsymbol{p}\cdot\Big[\boldsymbol{p}+\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p}'}W^1_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)\boldsymbol{p}'$$

$$+\frac{1}{V^2}\sum_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}''}W^1_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)W^1_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}''}$$

$$\times\mathscr{G}(\boldsymbol{p}'',\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}'',\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)\boldsymbol{p}''+\cdots\Big] \quad (6.4.24)$$

角标(L)表示阶梯图求和. 阶梯求和的级数可用一矢量顶角函数 $\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{L}}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p,\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)$表示为

$$\Pi^{(\mathrm{L})}(\mathrm{i}\omega)=\frac{2}{3}\frac{e^2}{m^2V}\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{1}{\beta}\sum_{\mathrm{i}p}\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)$$

$$\times\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{L}}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p,\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega) \quad (6.4.25)$$

$$\boldsymbol{\Gamma}^{(\mathrm{L})}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p,\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)=\boldsymbol{p}+\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p}'}\boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{L}}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)$$

$$\times W^1_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\mathrm{i}p,\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega) \quad (6.4.26)$$

将Γ^{L}展开就可得到图(c)中的级数.

下面求Π^{1},第一步是对 $\mathrm{i}p$ 求和

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\mathrm{i}p}\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)$$

$$\times W^{1}_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\mathrm{i}p,\mathrm{i}p+\mathrm{i}\omega)$$

$$=-2n_i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)\{\mathrm{Im}[G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p},\varepsilon)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\varepsilon)T_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\varepsilon)]$$

$$\times\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega+\varepsilon)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}p+\varepsilon)T_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}'}(\mathrm{i}\omega+\varepsilon)$$

$$+\mathrm{Im}[G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p},\varepsilon)G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p}',\varepsilon)T_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}}(\varepsilon)]$$

$$\times\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\varepsilon-\mathrm{i}\omega)\mathscr{G}(\boldsymbol{p}',\varepsilon-\mathrm{i}\omega)T_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\varepsilon-\mathrm{i}\omega)\}\qquad(6.4.27)$$

求和的方法是作通常的回路积分,在 $z=\varepsilon$ 和 $z=\varepsilon-\mathrm{i}\omega$处有割线.下一步是作解析延拓然后取虚数部分.

$$\mathrm{Im}[\Pi^{\mathrm{R}1}(\omega)]=\frac{-4e^2n_i}{m^2V^2}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}'\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)$$

$$\times\{\mathrm{Im}[G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p},\varepsilon)G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p}',\varepsilon)T_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\varepsilon)]\mathrm{Im}[G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p},\varepsilon+\omega)$$

$$\times G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p}',\varepsilon+\omega)T_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}}(\varepsilon+\omega)]+\mathrm{Im}[G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p},\varepsilon)G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p}',\varepsilon)$$

$$\times T_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}}(\varepsilon)]\mathrm{Im}[G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{p},\varepsilon-\omega)G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{p}'\varepsilon-\omega)T_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\varepsilon-\omega-\mathrm{i}\delta)]\}$$

$$(6.4.28)$$

在花括弧中的第二项作变换 $\varepsilon\to\varepsilon+\omega$, 则将超前函数变为推迟函数,它们互为复数共轭,因此复数部分也改变了符号. 重新排列后得到

$$\mathrm{Im}[\Pi^{\mathrm{R}1}(\omega)]=-\frac{4e^2n_i}{m^2V^2}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}'\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}[n_{\mathrm{F}}(\varepsilon)$$

$$-n_{\mathrm{F}}(\varepsilon+\omega)]\mathrm{Im}[G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p},\varepsilon)G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p}',\varepsilon)T_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\varepsilon)]$$

$$\times\mathrm{Im}[G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p},\varepsilon+\omega)G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{p}',\varepsilon+\omega)T_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}}(\varepsilon+\omega)]\qquad(6.4.29)$$

最后用ω除,并取极限 $\omega\to0$. 这样我们就得到第一个阶梯图对电导的贡献.

$$\sigma^1=\frac{4e^2n_i}{3m^2}\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}'\int\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}\left[-\frac{\partial n_\mathrm{F}(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right]$$
$$\times\mathrm{Im}[G^\mathrm{R}(\boldsymbol{p},\varepsilon)G^\mathrm{R}(\boldsymbol{p}',\varepsilon)T_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}(\varepsilon)]$$
$$\times\mathrm{Im}[G^\mathrm{R}(\boldsymbol{p},\varepsilon)G^\mathrm{R}(\boldsymbol{p}',\varepsilon)T_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}}(\varepsilon)] \tag{6.4.30}$$

进一步计算需要作一些近似. 首先取 T 矩阵是实数，因而可移到符号 Im 的外面. T 矩阵中的 ε 取为 ξ_p，则剩下的因子是

$$\{\mathrm{Im}[G^\mathrm{R}(\boldsymbol{p},\varepsilon)G^\mathrm{R}(\boldsymbol{p}',\varepsilon)]\}^2$$

将 G^R 写为

$$G^\mathrm{R}(\boldsymbol{p},\varepsilon)=\mathrm{Re}G-\frac{\mathrm{i}}{2}A$$

则有

$$\{\mathrm{Im}[G^\mathrm{R}(\boldsymbol{p},\varepsilon)G^\mathrm{R}(\boldsymbol{p}',\varepsilon)]\}^2$$
$$=\frac{1}{4}\{\mathrm{Re}[G(\boldsymbol{p},\varepsilon)]A(\boldsymbol{p}',\varepsilon)+\mathrm{Re}[G(\boldsymbol{p}',\varepsilon)]A(\boldsymbol{p},\varepsilon)\}^2$$
$$=\frac{1}{4}\{\mathrm{Re}[G(p,\varepsilon)]^2A(\boldsymbol{p}',\varepsilon)^2+\mathrm{Re}[G(\boldsymbol{p}',\varepsilon)]^2A(\boldsymbol{p},\varepsilon)^2$$
$$+2\mathrm{Re}[G(\boldsymbol{p},\varepsilon)]\mathrm{Re}[G(\boldsymbol{p}',\varepsilon)]A(\boldsymbol{p},\varepsilon)A(\boldsymbol{p}',\varepsilon)\} \tag{6.4.31}$$

作变换 $\boldsymbol{p}\rightleftarrows\boldsymbol{p}'$ 后，第一、二项是相等的. $n_i\to0$ 时其余 的项贡献很小，可以略去. 这样得到

$$\sigma^1=\frac{e^2}{3m^2}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}p^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}A(\boldsymbol{p},\varepsilon)^2\left[-\frac{\partial n_\mathrm{F}(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right]\Lambda(\boldsymbol{p},\varepsilon)$$
$$\Lambda(\boldsymbol{p},\varepsilon)=\frac{2n_i}{p^2}\int\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}'|T_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}|^2\{\mathrm{Re}[G^\mathrm{R}(\boldsymbol{p}',\varepsilon)]\}^2 \tag{6.4.32}$$

取 $\Lambda=1$，则得到 σ^0. 因此有

$$\sigma^0+\sigma^1=\frac{e^2}{3m^2}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^3}p^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}A(\boldsymbol{p},\varepsilon)^2\left[-\frac{\partial n_\mathrm{F}(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right]$$
$$\times[1+\Lambda(\boldsymbol{p},\varepsilon)] \tag{6.4.33}$$

$\Lambda(\boldsymbol{p},\ \varepsilon)$是阶梯图 Π^1 引入的顶角修正. 为了计算 $n_i\to0$ 时的

$\Lambda(\boldsymbol{p},\varepsilon)$先讨论$[\mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}]^2$. 考虑下式

$$\mathrm{Re}G=\frac{x}{x^2+\Delta^2},\quad x=\varepsilon-\xi_p-\mathrm{Re}\Sigma$$

$$\begin{aligned}\lim_{\Delta\to 0}[\mathrm{Re}G]^2&=\frac{x^2}{(x^2+\Delta^2)^2}=\frac{1}{x^2+\Delta^2}-\frac{\Delta^2}{(x^2+\Delta^2)^2}\\&=\frac{1}{2\Delta}A-\frac{1}{4}A^2=2\pi\delta(x)\left(\frac{1}{2\Delta}-\frac{1}{4\Delta}\right)\\&\simeq\frac{2\pi\delta(x)}{4\Delta}\end{aligned}\tag{6.4.34}$$

$\Delta\to 0$时$[\mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}]^2$发散,其行为与$A(\boldsymbol{p},\ \varepsilon)/4\Delta$相似. 这样,我们得到

$$\lim_{n_i\to 0}\Lambda(\boldsymbol{p},\varepsilon)=2\pi n_i\int\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}'}{p^2}|T_{pp'}|^2\frac{\delta(\varepsilon-\xi_{p'})}{\Delta(\boldsymbol{p}',\varepsilon)}$$

考虑到$\sigma^0+\sigma^1$表达式中有因子$\partial n_{\mathrm{F}}/\partial\varepsilon$,它要求$\varepsilon=0$,而$\delta(-\xi_{p'})$要求$p'=p_{\mathrm{F}}$. 定义输运散射几率为

$$\frac{1}{\tau_1(k)}=2\Delta_T=2\pi n_i\int\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}|T_{pp'}|^2\delta(-\xi_{p'})\left[1-\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}'}{p^2}\right]\tag{6.4.35}$$

$$\Lambda=\frac{1}{\Delta}(\Delta-\Delta_T)\tag{6.4.36}$$

其中$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}'/p^2=\cos\theta'$. 因为$\Lambda=\dfrac{1}{\Delta}(\Delta-\Delta_T)$,所以$n_i\to 0$时$\Lambda$不依赖于$n_i$.

阶梯图高级项的贡献引起附加的幂Λ^n.

$$\begin{aligned}\sigma^{\mathrm{L}}&=\sum_{n=0}^{\infty}\sigma^n=\frac{e^2}{3m^2}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^4}p^2A(\boldsymbol{p},0)^2[1+\Lambda+\Lambda^2+\Lambda^3+\cdots]\\&=\frac{e^2}{3m^2}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi)^4}p^2\frac{A(\boldsymbol{p},0)^2}{1-\Lambda}\end{aligned}\tag{6.4.37}$$

Λ^n是n级阶梯图的贡献. 上式中

$$\frac{1}{1-\Lambda}=\frac{1}{1-(\Delta-\Delta_T)/\Delta}=\frac{\Delta}{\Delta_T}$$

考虑到 $A^2 \to A/\Delta$，则电导的结果为

$$\lim_{n_i \to 0} \sigma^{\mathrm{L}} = \frac{e^2}{3m^2}\int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} p^2 \frac{\delta(\xi_p)}{\Delta_T}$$

$$= \frac{2e^2}{3m^2}\int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3} p^2 \tau_1(P)\left[-\frac{\partial n_F(\xi_p)}{\partial \xi_p}\right] \tag{6.4.38}$$

此式是希望得到的结果. 弛豫时间 $\tau_1(p)$ 包含因子 $1-\cos\theta'$，这是经典理论所要求的.

以上介绍的格林函数推导比输运方程的推导要困难. 格林函数方法的优点是它并不要求作近似 $n_i \to 0$. 而 Boltzmann 方程的结果包含假定 $n_i \to 0$，因为我们假定电子是平面波，只偶然受到孤立杂质的散射. 格林函数方法的推导强调了极限 $n_i \to 0$ 的重要性. 并用它讨论有关项的发散性. 事实上不作 $n_i \to 0$ 的假定也可用格林函数方法求出 Kubo 公式.

阶梯图的求和中有几点值得注意，阶梯图虽然出现在微扰论的高级项中，但对最后结果的贡献并不比低级项小. 因此，微扰论的高级项并不一定是小的. 这表明在任何研究中都不能忽略顶角修正. 它可能是小的，但必须经过证明. 一般来说，当势散射引起两个粒子的相对能量变化比较小时，顶角修正就比较大.

参考文献

[1] S.F. Edwards, *Phil. Mag.*, **3** (1958), 1020.

[2] L. Tewordt, *Phys. Rev.*, **129** (1963), 657.

[3] T. Tsuneto *Phys. Rev.*, **121** (1961), 402.

[4] A. A. 阿布里科索夫，Л. П. 戈尔可夫，И. Е. 加洛辛斯基，统计物理学中的量子场论方法，科学出版社，(1963)

[5] S. Doniach, E.H. Sondheimer, *Green's functions for Solid State Physicists*, Benjamin, New York, (1974)

[6] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New

York, (1981).

[7] 蔡建华等,量子统计的格林函数方法,科学出版社 (1982).

[8] L. P. Kadanoff, G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics*, Benjamin, New York, (1962).

第七章　超导电性

§ 7.1　BCS 理论概述

由于在近半个世纪内许多物理学家科研成果的积累，到本世纪五十年代，建立超导微观理论的时机已经逐渐酝酿成熟．当时人们所认识到的超导本质是：

(1) 在超导态中电子发生了某种有序变化，这种有序是长程序，相干长度约为 10^{-4} 厘米．

(2) 在超导态电子能谱中有能隙存在．

(3) 同位素效应表明：电声作用在导致超导态时起着关键作用．

1950 年 Frölich 首先建议固体中电子与声子的耦合可以使电子之间产生吸引作用[1]．这个概念的物理图象是：当一电子行经可极化的晶格点阵时，正离子点阵会发生形变，这是因为正离子向这个电子所在位置附近靠拢可降低其静电能的缘故；这样，在这电子附近就造成局部正电荷密度的增加，而这就会使另一电子向这个区域靠近．这就是说，由于晶格的极化，在这两个电子间产生了一种有效的吸引作用。

在这种电声作用机制下，1956 年 Cooper 完成了导致超导微观理论成功的关键一步[2]．在对一个简单的双电子模型进行计算之后，Cooper 指出：只要这两个电子间存在有净吸引作用，不论多么弱，结果就能形成电子对束缚态．这对中的两个电子具有相等而相反的动量，自旋相反，记为

$$(\boldsymbol{k}\uparrow, -\boldsymbol{k}\downarrow).$$

计算表明，这时由两电子间相互吸引位势所引起的位能降低超过

了比 $2E_F$ (E_F 为费密能级)多出的量，结果总能量 E 比 $2E_F$ 为低. 通称这种电子对为 Cooper 对.

根据上述结果，Cooper 认为，正常金属可能出现一种费密海的不稳定性. 因为，正常金属中的原有电子有可能重新组合它们自己，使电子进入 Cooper 对态，从而多体系统进入比 Fermi 海能量更低的稳定状态. 人们预期这就导致出现超导基态. 当然，Cooper 所讨论的问题只是于费密海之外包含了两个有净吸引的电子[2]，所以，进一步应考虑把 Cooper 的简单结果推广到多电子系统 这就是 Bardeen, Cooper 和Schrieffer 所完成的工作，现称为BCS 理论.

BCS 超导电性理论的基本假设是认为：超导电性的本质特征是由 Cooper 二体关联(对关联)所引起的，并取($\boldsymbol{k}\uparrow$，$-\boldsymbol{k}\downarrow$)对态来处理这种二体关联.

一、超导基态波函数

引入二次量子化算符 $C^+_{\boldsymbol{k},\sigma}$, $C_{\boldsymbol{k},\sigma}$，它们分别表示电子产生算符和电子消灭算符，这些电子处于动量为 $\boldsymbol{k}$ 的 Bloch 态，自旋为 σ，它们满足对易关系

$$[C_{\boldsymbol{k},\sigma}, C^+_{\boldsymbol{k}',\sigma'}]_+ = \delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma\sigma'} \tag{7.1.1}$$

$$[C_{\boldsymbol{k},\sigma}, C_{\boldsymbol{k}',\sigma'}]_+ = 0 \tag{7.1.2}$$

而

$$n_{\boldsymbol{k},\sigma} = C^+_{\boldsymbol{k}',\sigma} C_{\boldsymbol{k},\sigma} \tag{7.1.3}$$

表示单粒子数算符. 在 BCS 理论中还引入了一组"对"产生算符

$$b^+_{\boldsymbol{k}} = C^+_{\boldsymbol{k}\uparrow} C^+_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \tag{7.1.4}$$

相应的消灭算符为

$$b_{\boldsymbol{k}} = C_{-\boldsymbol{k}\downarrow} C_{\boldsymbol{k}\uparrow} \tag{7.1.5}$$

BCS 采用类似 Hartree 近似的方法建立超导基态波函数，即

认为，不同动量 $\boldsymbol{k}$ 的对态($\boldsymbol{k}\uparrow, -\boldsymbol{k}\downarrow$)被占据是互相独立的。引入 $v_{\boldsymbol{k}}$ 代表发现 $\boldsymbol{k}$ 对态被占据的几率振幅，$u_{\boldsymbol{k}}$ 为发现 $\boldsymbol{k}$ 对态未被占据的几率振幅. 注意，对于超导基态($T=0$K)，没有 $\boldsymbol{k}\uparrow$ 被电子占据而 $-\boldsymbol{k}\downarrow$ 空着的位形. 这样，在 BCS 建立的超导基态波函数中，与每一动量 $\boldsymbol{k}$ 相应的部分可分解为两项

$$v_{\boldsymbol{k}}\phi_1 + u_{\boldsymbol{k}}\phi_0 \tag{7.1.6}$$

ϕ_1 表示由 $\boldsymbol{k}$ 标志的对态一定被占，而在 ϕ_0 中这对态是空的. 归一化条件要求

$$u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2 = 1 \tag{7.1.7}$$

按照 Hartree 近似的精神，超导基态波函数可表示为各个对态的乘积：

$$\Psi_{\text{BCS}} = \left\{\prod_{\boldsymbol{k}} (u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}}^{+})\right\}\Phi_0 \tag{7.1.8}$$

其中 Φ_0 表示“真空态”. 要点是 BCS 考虑了一个简化问题，在超导基态波函数中只包括态是成对地被占着(或空着)的位形. 相应的相互作用位势是

$$V_{\text{简化}} = -\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} b_{\boldsymbol{k}'}^{+} b_{\boldsymbol{k}} \tag{7.1.9}$$

总哈密顿量为

$$H_{\text{简化}} = \sum_{\boldsymbol{k}} 2\varepsilon_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}}^{+} b_{\boldsymbol{k}} - \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} b_{\boldsymbol{k}'}^{+} b_{\boldsymbol{k}} \tag{7.1.10}$$

其中电子能量以费密能级(E_{F})为零点.

为了计算相互作用能，按着($\boldsymbol{k}\uparrow, -\boldsymbol{k}\downarrow$)及($\boldsymbol{k}'\uparrow, -\boldsymbol{k}'\downarrow$)两个对态可发生的被占据之可能性把 Ψ 进行如下分解：

$$\Psi = v_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}'}\phi_{11} + v_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}'}\phi_{10} + u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}'}\phi_{01} + u_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}'}\phi_{00} \tag{7.1.11}$$

其中 ϕ_{11} 表示以 $\boldsymbol{k}$ 及 $\boldsymbol{k}'$ 标志的两个对态均被占据，ϕ_{10}，ϕ_{01} 及 ϕ_{00} 的意义可类推. 按(7.1.11)计算哈密顿量(7.1.10)的预期值得：

$$W=2\sum_{k}\varepsilon_k v_k^2-\sum_{k,k'}u_k v_k u_{k'} v_{k'} V_{kk'} \tag{7.1.12}$$

其中第一项表示所有对的动能，v_k^2 表示"对"占据的几率. 第二项表示由电子间相互散射作用引起的位能；若要从 $\boldsymbol{k}$ 对态散射到 $\boldsymbol{k}'$ 对态，则必须在初态时以 $\boldsymbol{k}$ 标志的对态是被占据的，而以 $\boldsymbol{k}'$ 为标志的对态则是空着的，在末态则是以 $\boldsymbol{k}$ 标志的对态是空态而以 $\boldsymbol{k}'$ 标志的对态是被占据的. 于是由(7.1.11)式可见，(7.1.12)式中第二项的系数确实应是 $u_k v_k u_{k'} v_{k'}$.

下面的工作就是使能量 W 具有极小值以定出 u_k 和 v_k. 为方便起见，考虑到(7.1.7)式，令

$$\begin{aligned} v_k^2 &= h_k \\ u_k^2 &= 1-h_k \end{aligned} \tag{7.1.13}$$

则(7.1.12)式可写为

$$W=2\sum_{k}\varepsilon_k h_k-\sum_{k,k'}[h_k(1-h_k)h_{k'}(1-h_{k'})]^{\frac{1}{2}}V_{kk'} \tag{7.1.14}$$

W 具有极小值的条件为 $\dfrac{\partial W}{\partial h_k}=0$，由此即可求得

$$h_k\equiv v_k^2=\frac{1}{2}\left[1-\frac{\varepsilon_k}{(\Delta_k^2+\varepsilon_k^2)^{\frac{1}{2}}}\right] \tag{7.1.15}$$

$$1-h_k\equiv u_k^2=\frac{1}{2}\left[1+\frac{\varepsilon_k}{(\Delta_k^2+\varepsilon_k^2)^{\frac{1}{2}}}\right] \tag{7.1.16}$$

其中

$$\Delta_k=\sum_{k'}V_{kk'}[h_{k'}(1-h_{k'})]^{\frac{1}{2}} \tag{7.1.17}$$

为确定 h_k 就需求出 Δ_k. BCS 理论假设：

$$-V_{kk'}=\begin{cases}-V, & -\hbar\omega_c<\varepsilon_k,\varepsilon_{k'}<\hbar\omega_c \\ 0, & \text{其它区域}\end{cases} \tag{7.1.18}$$

这里 $\varepsilon_k, \varepsilon_{k'}$ 的值从费密能计起，ω_c代表某种平均声子频率，叫作截断频率. (7.1.18)的意义是，在费密面附近，能量宽度为 $2\hbar\omega_c$ 的能量壳内，$-V_{kk'}=-V(V>0)$是吸引作用，而在这壳层之外则为零，这叫作 BCS 截断.

以(7.1.18)代入(7.1.17)式，考虑到(7.1.15)，(7.1.16)式，我们得到方程(7.1.17)的非零解为:

$$\Delta_k=\begin{cases}\Delta, & 当 |\varepsilon_k|<\hbar\omega_c \\ 0, & 当 |\varepsilon_k|>\hbar\omega_c\end{cases} \tag{7.1.19}$$

而Δ满足下列方程:

$$\Delta=V\sum_{k'}\frac{\Delta}{2(\varepsilon_{k'}^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}} \tag{7.1.20}$$

上式左右两方可消去Δ得:

$$\frac{1}{V}=\sum_{k'}\frac{1}{2(\varepsilon_{k'}^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}} \tag{7.1.21}$$

以积分代替求和得

$$\frac{1}{N(0)V}=\int_0^{\hbar\omega_c}\frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2}} \tag{7.1.22}$$

其中 $N(0)$ 代表在费密能 E_F 处的 Bloch 态密度（对单个自旋而言），设在费密面附近态密度为一常数，由此即得

$$\Delta=\frac{\hbar\omega_c}{\sinh\left[\frac{1}{N(0)V}\right]}\approx 2\hbar\omega_c e^{-\frac{1}{N(0)V}} \tag{7.1.23}$$

其中最后一个近似等号是在 $N(0)V\ll 1$ 条件下得到的，此即弱耦合条件. 在许多现实情况下满足此条件. 结合(7.1.15)，(7.1.16)及(7.1.23)式即可求出 h_k. 图7.1 画出了在超导基态中对态占据函数 h_k 随 ε_k 的变化. 图中实线表示 $T=0$K 下超导基态的对占据函数，虚线表示在 $T=T_c$(超导转变温度)处正常金属电子的费

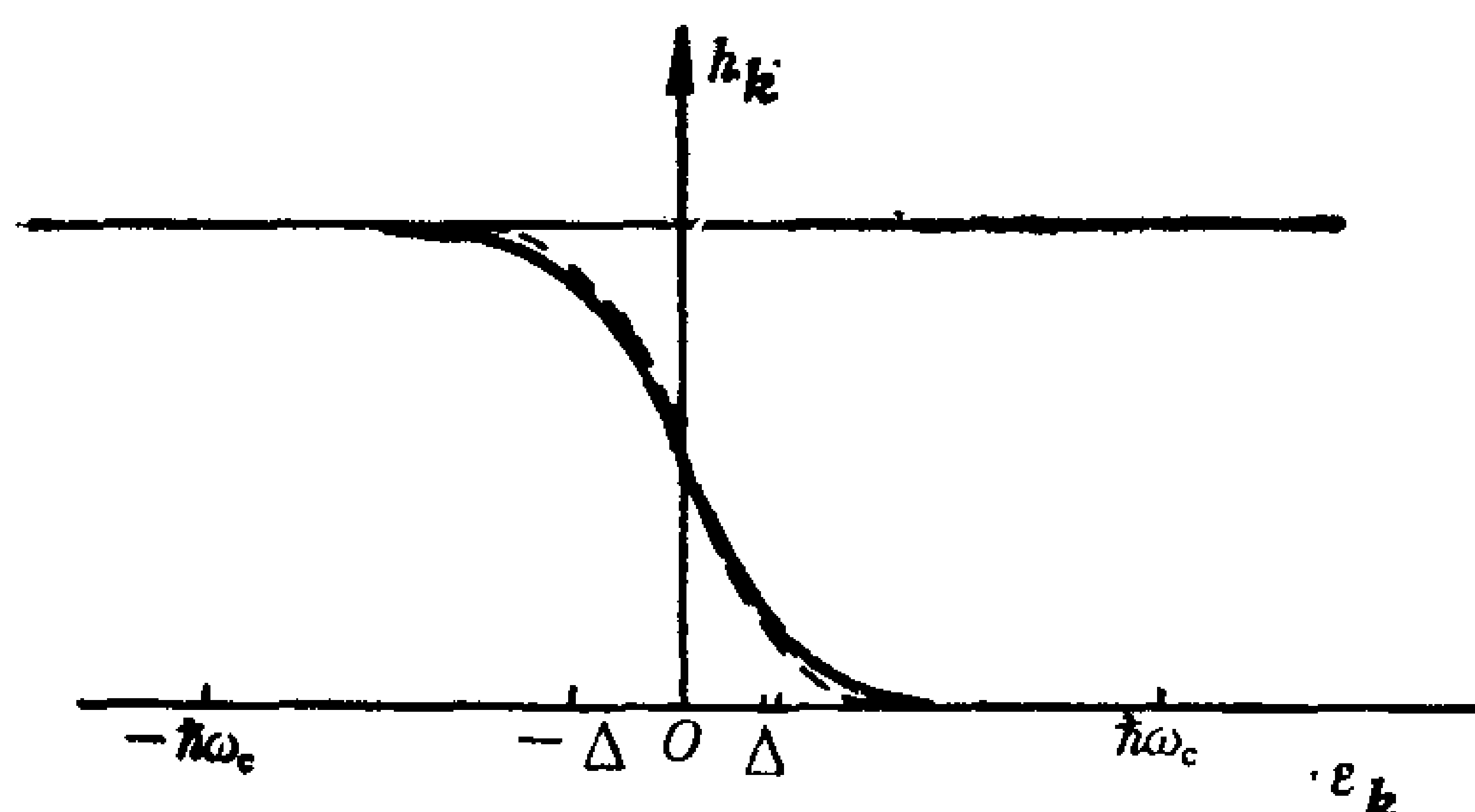


图 7.1 对态占据函数随 ε_k 的变化.

密分布函数. 我们看到,这两者十分相似. 然而,应该注意, 在正常金属中是以单电子动量态占有数的改变来标志正常金属中电子系统随温度所发生的变化的,除服从 Pauli 原理外,这些单电子动量态的占据是互不相干的. 与此相反,超导基态波函数是(7.1.8)式,所有在其中的电子组态是相干迭加,而且所涉及的配对态都是总动量为零及单一态自旋波函数. 相对于正常金属情况而言, 这是在动量空间中的一种有序表现.

二、超导基态能量

现在计算相对于费密海而言的超导基态能量. 易于看出 $\Delta=0$ 就相当于正常金属,从而由(7.1.15)看出这时有:

$$h_k=\begin{cases}1, & \varepsilon_k<0\\ 0, & \varepsilon_k>0\end{cases} \tag{7.1.24}$$

以 h_k 的这些值代入前述基态能量公式中就得正常金属费密海的能量.

若以 K_s 表示超导基态的动能, K_N 表示正常金属基态(费密海)的动能,则由(7.1.14)式并注意到(7.1.24)式即有:

$$K_s-K_N=4\sum_{k>k_F}\varepsilon_k h_k \tag{7.1.25}$$

在以上推导中用了$[1-h(-\varepsilon)]=h(\varepsilon)$的关系．以(7.1.15)式代入上式并以积分代求和即得：

$$K_s-K_N=2N(0)\int_0^{\hbar\omega_c}\left[\varepsilon-\frac{\varepsilon^2}{(\varepsilon^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}}\right]d\varepsilon$$

$$=\frac{\Delta^2}{V}-\frac{1}{2}N(0)\Delta^2 \tag{7.1.25'}$$

在以上推导最后一步时用了(7.1.23)式，它可表为

$$\frac{1}{N(0)V}=\sinh^{-1}\left(\frac{\hbar\omega_c}{\Delta}\right) \tag{7.1.23'}$$

另外，由(7.1.14)式第二项可有

$$V_s-V_N=-\sum_k\left[\sum_{k'}V_{kk'}\sqrt{h_{k'}(1-h_{k'})}\right]\sqrt{h_k(1-h_k)}$$

$$=-\Delta\sum_k\sqrt{h_k(1-h_k)}$$

$$=-N(0)\Delta^2\int_0^{\hbar\omega_c}\frac{d\epsilon}{\sqrt{\Delta^2+\epsilon^2}}=-\frac{\Delta^2}{V} \tag{7.1.26}$$

于是相对于费密海而言，超导基态的能量可由(7.1.25')与(7.1.26)之和求出：

$$W_s-W_N=-\frac{1}{2}N(0)\Delta^2\approx-2N(0)(\hbar\omega_c)^2\exp\left[-\frac{2}{N(0)V}\right] \tag{7.1.27}$$

其中最后一个等号利用了弱耦合条件．

由(7.1.27)式可见，只要平均地说有一净的吸引相互作用，无论多么弱，就存在一个相干态，其能量比正常金属基态能量低．$-\frac{1}{2}N(0)\Delta^2$ 应该就是 $T=0$K 下的凝聚能．

三、$T=0$K 的能隙

现在讨论从超导基态而来的激发．设向超导基态注入一个电

子，使它处于 $\boldsymbol{k}_1\uparrow$ 态，而其配对态 $-\boldsymbol{k}_1\downarrow$ 则空着。这一注入的后果使 $(\boldsymbol{k}_1\uparrow, -\boldsymbol{k}_1\downarrow)$ 对态不再能参与由配对相互作用所导致的散射事件了．现在求激发能．超导基态能量已由(7.1.12)表示，现在由于把 $(\boldsymbol{k}_1\uparrow, -\boldsymbol{k}_1\downarrow)$ 对态排除了，于是 (7.1.12) 式的能量增加为

$$-2\varepsilon_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_1}^2 + 2\left[\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}'} v_{\boldsymbol{k}'}\right] u_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_1}$$

其中第二项表示减去了这对态和其它所有对态之间的相互作用．此外还应考虑到，系统除了增加上述能量之外，还加上了单粒子能量 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}_1}$．于是，对超导基态注入了这一电子后，超导基态被激发，其总激发能为

$$\varepsilon_{\boldsymbol{k}_1}[1-2v_{\boldsymbol{k}_1}^2] + 2\Delta_{\boldsymbol{k}_1} u_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_1} \tag{7.1.28}$$

引入

$$E_{\boldsymbol{k}_1} = \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon_{\boldsymbol{k}_1}^2}$$

利用(7.1.15)，(7.1.16)及(7.1.19)式可有

$$\varepsilon_{\boldsymbol{k}_1}[1-2v_{\boldsymbol{k}_1}^2] + 2\Delta_{\boldsymbol{k}_1} u_{\boldsymbol{k}_1} v_{\boldsymbol{k}_1} = \frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}_1}^2}{E_{\boldsymbol{k}_1}} + \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}_1}^2}{E_{\boldsymbol{k}_1}} = E_{\boldsymbol{k}_1}$$

这就是说，从超导基态产生一个在 $\boldsymbol{k}\uparrow$ 态的单激发准粒子的激发能是

$$E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon_{\boldsymbol{k}}^2} \tag{7.1.29}$$

这里，单激发准粒子一词的意义是，在 $(\boldsymbol{k}\uparrow, -\boldsymbol{k}\downarrow)$ 对态中的一个态并且仅是一个态被占据．

当 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}=0$ 时(7.1.29)式所表示的激发能最小，其值为 Δ．如果破坏一个 Cooper 对就会产生两个准粒子，其最小激发能为 2Δ．

注意，现在所讲的准粒子态是与 Bloch 态一一对应的，所以很易计算激发的准粒子态密度．设以 $N(0)$ 表示在费密面附近的 Bloch 态电子态密度，即在费密面附近 ε 到 $\varepsilon+\mathrm{d}\varepsilon$ 能量间隔内对

每个自旋而言的Bloch单电子态的数目为$N(0)\mathrm{d}\varepsilon$，于是在$E$到$E+\mathrm{d}E$能量间隔内单粒子激发态的数目为

$$\rho(E)\mathrm{d}E=N(0)\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}E}\mathrm{d}E=\frac{N(0)}{\mathrm{d}E/\mathrm{d}\varepsilon}\mathrm{d}E \tag{7.1.30}$$

而因为　$E=\sqrt{\Delta^2+\varepsilon^2}$，所以

$$\rho(E)\mathrm{d}E=N(0)\frac{E}{\sqrt{E^2-\Delta^2}}\mathrm{d}E,\quad E\geqslant\Delta \tag{7.1.31}$$

四、$T>0\mathrm{K}$ 下的 BCS 理论

在$T>0\mathrm{K}$将产生热激发准粒子，这引起能量和熵的增加. 下面把系统中激发的准粒子视为费密理想气体，用自由能极小的条件来确定在一定温度下的热平衡性质.

与(7.1.14)式第一项对应的是

$$W_{KE}=2\sum_{k}[\varepsilon_k f_k+\varepsilon_k h_k(1-2f_k)] \tag{7.1.32}$$

其中f_k为费密分布函数. 上式中第一项为费密气体的动能；第二项与(7.1.14)式中第一项是完全相当的；它表示在有限温度下已然减少了的"基态对"所贡献的动能，因子$(1-2f_k)$正是保证对中任何一态不被准粒子占有的几率.

在有限温度下的对关联位能为

$$W_{\mathrm{PE}}=-\sum_{k,k'}V_{kk'}[h_k(1-h_k)h_{k'}(1-h_{k'})]^{\frac{1}{2}}(1-2f_k)(1-2f_{k'}) \tag{7.1.33}$$

它与(7.1.14)式中第二项对应.

熵由热激发准粒子所贡献，用费密理想气体的熵计算公式有

$$S=-2k_{\mathrm{B}}\sum_{k}[f_k\ln f_k+(1-f_k)\ln(1-f_k)], \tag{7.1.34}$$

最后得自由能为

$$F=2\sum_{k}\varepsilon_k[f_k+h_k(1-2f_k)]-\sum_{k,k'}V_{kk'}[h_k(1-h_k)h_{k'}$$

$$\times(1-h_{k'})]^{\frac{1}{2}}$$

$$\times(1-2f_k)(1-2f_{k'})+2k_{\mathrm{B}}T\sum_{k}[f_k\ln f_k$$

$$+(1-f_k)\ln(1-f_k)] \tag{7.1.35}$$

对 h_k 求自由能极小，$\frac{\partial F}{\partial h_k}=0$，经计算后得：

$$h_k=\frac{1}{2}\left(1-\frac{\varepsilon_k}{E_k}\right)$$

$$1-h_k=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\varepsilon_k}{E_k}\right) \tag{7.1.36}$$

其中

$$E_k=\sqrt{\Delta_k^2+\varepsilon_k^2} \tag{7.1.37}$$

而 Δ_k 满足如下的能隙方程

$$\Delta_k=\sum_{k'}V_{kk'}[h_{k'}(1-h_{k'})]^{\frac{1}{2}}(1-2f_{k'}) \tag{7.1.38}$$

对 f_k 求自由能极小即得：

$$f_k=\frac{1}{\mathrm{e}^{E_k/k_{\mathrm{B}}T}+1}=f(E_k) \tag{7.1.39}$$

$f(E_k)$ 是费密函数，即表示这些热激发准粒子分布和费密理想气体分布一样，但其色散关系则由(7.1.37)式给出.

为确定 $T>0$K下的能隙，以(7.1.39)，(7.1.36)代入(7.1.38)式，计算方法与 $T=0$K 时一样作 BCS 截断，并取 $\Delta_{k'}=\Delta_k=\Delta$，$V_{kk'}=V$，最后得

$$\frac{1}{V}=\sum_{k}\frac{1}{2E_k}\tanh\frac{E_k}{2k_{\mathrm{B}}T} \tag{7.1.40}$$

以积分代替求和即得：

$$\frac{1}{N(0)V}=\int_0^{\hbar\omega_c}\frac{\tanh[(\varepsilon^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}/2k_BT]}{(\varepsilon^2+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}}\mathrm{d}\varepsilon \qquad (7.1.41)$$

由此式可确定 $T>0\mathrm{K}$ 下的能隙.

当 $T=0\mathrm{K}$ 时,(7.1.41) 就还原为(7.1.22). 在 $T=T_c$(超导转变温度)时,Δ 应为零,由此可见,在(7.1.41)中令 $\Delta=0$ 即得确定 T_c 的方程:

$$\frac{1}{N(0)V}=\int_0^{\hbar\omega_c}\frac{\tanh(\varepsilon/2k_BT_c)}{\varepsilon}\mathrm{d}\varepsilon \qquad (7.1.42)$$

作换元,令 $x=\varepsilon/2k_BT_c$,将右方积分先进行部分积分,再考虑到 $k_BT_c\ll\hbar\omega_c$ 就得到:

$$k_BT_c=1.14\hbar\omega_c\exp\left[-\frac{1}{N(0)V}\right] \qquad (7.1.43)$$

在得到上式时利用了下列关系:

$$\int_0^{\infty}\frac{\ln x}{\mathrm{ch}^2x}\mathrm{d}x=-\ln\left(\frac{4\gamma}{\pi}\right),$$

其中 $\ln\gamma=c=0.577$. (7.1.43)就是确定超导转变温度的 BCS 公式. 在推导时所用的

$$k_BT_c\ll\hbar\omega_c$$

之条件相当于(参见(7.1.43)式)

$$N(0)V\ll 1$$

即弱耦合条件.

在 BCS 理论中还导出了下列公式:

$$\Delta(0)=2\hbar\omega_c\exp\left[-\frac{1}{N(0)V}\right] \qquad (7.1.44)$$

$\Delta(0)$是绝对零度下的能隙. 比较(7.1.43)及(7.1.44)式即得:

$$2\Delta(0)=3.52k_BT_c \qquad (7.1.45)$$

理论还表明,靠近 T_c 处的能隙可表示为

$$\Delta(T)\approx 3.2k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}\left[1-\left(\frac{T}{T_{\mathrm{c}}}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{7.1.46}$$

在 T_c 处超导态与正常态的电子比热容跳跃为

$$\left.\frac{c_{\mathrm{es}}-\gamma T_{\mathrm{c}}}{\gamma T_{\mathrm{c}}}\right|_{T_{\mathrm{c}}}=1.43 \tag{7.1.47}$$

其中 c_{es} 为超导态下的电子比热容，γ 为正常态金属低温下电子比热容系数. 在 $T\ll\Delta$ 的低温下超导态的电子比热容可近似写为:

$$c_{\mathrm{es}}\propto\sqrt{T}\exp[-\Delta_0/k_{\mathrm{B}}T] \tag{7.1.48}$$

我们这里略去了对公式(7.1.44)到(7.1.48)的 BCS 理论证明. 在以下几节我们将用格林函数方法证明这些结果.

§7.2 $T=0$K 下超导电性的格林函数理论

从本节起我们用格林函数方法研究超导电性. 这一方法具有很大的优越性. 先讲 $T=0$K 下的超导理论.

一、BCS 电子间等效相互作用的模型哈密顿量

在§7-1 节讲到，BCS 超导理论是以电声机制导致电子间存在吸引作用为基础的. 二次量子化形式下电子声子相互作用哈密顿量 $\hat{H}_{ep}$ 可写为:

$$\hat{H}_{\mathrm{ep}}=g\int\mathrm{d}^3x\,\hat{\psi}^{+}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_{\alpha}(\boldsymbol{x})\hat{\phi}(\boldsymbol{x}) \tag{7.2.1}$$

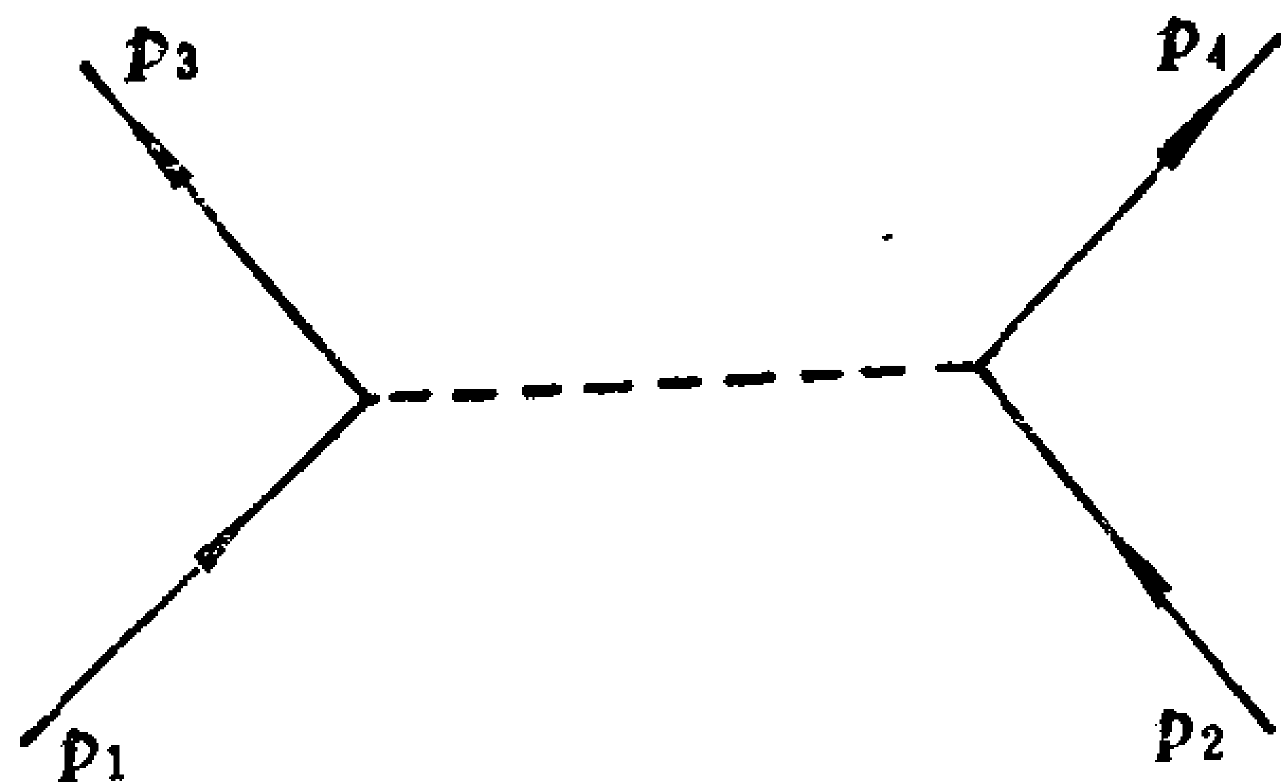


图 7.2 电子 1 和 2 间交换一个声子

g 是电声作用常数. 对于 BCS 超导电性机制而言，我们要考虑两个电子交换一个声子的相互作用散射问题，如图 7.2 所示. 按照 §5.2 的分析，可以把 g^2D^0 看作是一个等效的二体势，即通过交换声子在两电子间引起的有效相互作用 $V(x_1-x_2)$ 可由下列代换得到

$$V(x_1-x_2) \longrightarrow g^2D^0(x_1-x_2) \tag{7.2.2}$$

下面证明，对于金属在费密面附近能量宽度远小于德拜频率 ω_D 的范围内的电子来说，由上式所决定的有效相互作用具有吸引性质. 采用动量能量表象，利用第五章(5.1.38)式得

$$V_{\text{等效}} = g^2 \frac{(\omega^0_{p_3-p_1})^2}{\omega^2-(\omega^0_{p_3-p_1})^2+\mathrm{i}\delta} \tag{7.2.3}$$

利用下面的声子色散关系

$$\omega^0_{\boldsymbol{k}} = s|\boldsymbol{k}|$$

则由(7.2.3)式得:

$$V_{\text{等效}} = g^2 \frac{s^2|\boldsymbol{p}_3-\boldsymbol{p}_1|^2}{(\varepsilon_3-\varepsilon_1)^2-s^2|\boldsymbol{p}_3-\boldsymbol{p}_1|^2+\mathrm{i}\delta} \tag{7.2.4}$$

其中 $\varepsilon_3-\varepsilon_1$，$\boldsymbol{p}_3-\boldsymbol{p}_1$ 是图 7-2 中相互散射的两电子中第一个电子的能量变化与动量变化. 在费密面附近的电子相互散射时，其动量变化之大小通常为费密动量(p_0)，所以有:

$$s|\boldsymbol{p}_3-\boldsymbol{p}_1| \approx sp_0 \approx \frac{s}{a} \approx \omega_D$$

另一方面，在费密面附近相互散射时，电子的能量变化可不大，例如图 7.3 的示例情形.

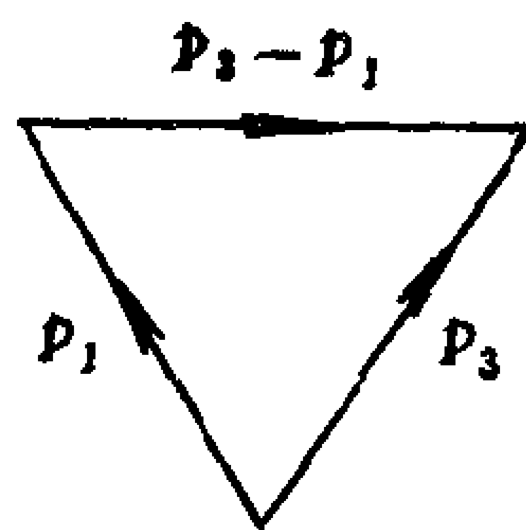


图 7.3 $|\boldsymbol{p}_1| = |\boldsymbol{p}_3| = p_0$

$|\boldsymbol{p}_3-\boldsymbol{p}_1| \approx p_0$

由此可见，由(7.2.4)式表达的等效相互作用在

$$|\varepsilon_3-\varepsilon_1|\ll\omega_D \tag{7.2.5}$$

的区域内近似为常数$-g^2$，即具有吸引性质．今后取下列符号：

$$V_{等效}\approx -g^2\equiv\lambda \tag{7.2.6}$$

注意，$\lambda<0$．在坐标空间中两电子的等效相互作用可写为

$$V(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{p}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)}\lambda=\lambda\delta(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2) \tag{7.2.7}$$

于是，在坐标表象中两电子间等效相互作用哈密顿量为

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\mathrm{int}}&=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})\\&=\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}')\lambda\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})\\&=\frac{\lambda}{2}\int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}) &(7.2.8)\\&\equiv\frac{\lambda}{2}\int \mathrm{d}^3x(\hat{\psi}^+(\hat{\psi}^+\hat{\psi})\hat{\psi}) &(7.2.8')\end{aligned}$$

其中$(\hat{\psi}^+\hat{\psi})\equiv\hat{\psi}_\alpha^+\hat{\psi}_\alpha$

现在求动量表象中的$\hat{H}_{\mathrm{int}}$．二次量子化形式的一般公式为

$$\hat{H}_{\mathrm{int}}=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{p}_3,\boldsymbol{p}_4\\ \lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4}}\langle\boldsymbol{p}_1\lambda_1,\boldsymbol{p}_2\lambda_2|V|\boldsymbol{p}_4\lambda_4,\boldsymbol{p}_3\lambda_3\rangle a_{\boldsymbol{p}_1\lambda_1}^+a_{\boldsymbol{p}_2\lambda_2}^+a_{\boldsymbol{p}_3\lambda_3}a_{\boldsymbol{p}_4\lambda_4} \tag{7.2.9}$$

以(7.2.7)式代入计算，注意到现在V与自旋无关则有：

$$\hat{H}_{\mathrm{int}}=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{p}_3,\boldsymbol{p}_4\\ \alpha,\beta}}\iint \mathrm{d}\boldsymbol{x}_1\mathrm{d}\boldsymbol{x}_2\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{x}_1}\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{x}_2}$$

$$\times\lambda\delta(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_3\cdot\boldsymbol{x}_2}\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_4\cdot\boldsymbol{x}_1}a_{\boldsymbol{p}_1\alpha}^+a_{\boldsymbol{p}_2\beta}^+a_{\boldsymbol{p}_3\beta}a_{\boldsymbol{p}_4\alpha}$$

$$
=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\right)^4\sum\iint \mathrm{d}\boldsymbol{x}_1\mathrm{d}\boldsymbol{x}_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_4)\cdot\boldsymbol{x}_1}
$$

$$
\times\lambda\delta(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)\mathrm{e}^{+\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_3-\boldsymbol{p}_2)\cdot\boldsymbol{x}_2}
$$

$$
\times a^+_{\boldsymbol{p}_1\alpha}a^+_{\boldsymbol{p}_2\beta}a_{\boldsymbol{p}_3\beta}a_{\boldsymbol{p}_4\alpha}
$$

$$
=\frac{\lambda}{2}\frac{1}{(2\pi)^3}\sum_{\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{p}_3+\boldsymbol{p}_4}a^+_{\boldsymbol{p}_1\alpha}a^+_{\boldsymbol{p}_2\beta}a_{\boldsymbol{p}_3\beta}a_{\boldsymbol{p}_4\alpha} \tag{7.2.10}
$$

上式中对 $\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{p}_3,\boldsymbol{p}_4$ 之求和要满足动量守恒定律

$$
\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{p}_3+\boldsymbol{p}_4 \tag{7.2.11}
$$

按照 BCS 截断模型，对 $\boldsymbol{p}$ 的取值应有限制，(7.2.10)式更确切的写法应是

$$
\hat{H}_{\mathrm{int}}=\frac{\lambda}{2}\frac{1}{(2\pi)^3}\sum_{\substack{\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{p}_3,\boldsymbol{p}_4\\ \boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{p}_3+\boldsymbol{p}_4}}a^+_{\boldsymbol{p}_1\alpha}a^+_{\boldsymbol{p}_2\beta}a_{\boldsymbol{p}_3\beta}a_{\boldsymbol{p}_4\alpha}\theta_{\boldsymbol{p}_1}\theta_{\boldsymbol{p}_2}\theta_{\boldsymbol{p}_3}\theta_{\boldsymbol{p}_4} \tag{7.2.12}
$$

其中 $\lambda<0$. 称 θ 为截断因子：

$$
\theta_p=\begin{cases}1, & 当\,|\varepsilon(\boldsymbol{p})-\varepsilon_{\mathrm{F}}|<\omega_{\mathrm{D}}\\ 0, & 当\,|\varepsilon(\boldsymbol{p})-\varepsilon_{\mathrm{F}}|>\omega_{\mathrm{D}}\end{cases} \tag{7.2.13}
$$

截断因子表示，只有能量在费密面附近宽度为 $2\omega_{\mathrm{D}}$($\omega_{\mathrm{D}}\ll\varepsilon_{\mathrm{F}}$. 在 §7-1，截断频率曾以 ω_c 表示，ω_c 与 ω_{D} 同数量级）的能量窄层内的电子才参与相互作用. 今后在使用(7.2.8) 式时也作类似的理解，即：$\hat{\psi}^+(x)\hat{\psi},(x)$的富氏分量和 θ_p 一样地截断.

二、时空表象中的 Gorkov 方程组，Gorkov 假设

现在建立描述金属超导态性质的 Green 函数方程组[4]. 本节限于讨论绝对零度下的情况. 在二次量子化形式下电子系统的总哈密量是

$$
\hat{H}=\int\left\{-\left(\hat{\psi}^+\frac{\nabla^2}{2m}\hat{\psi}\right)+\frac{\lambda}{2}(\hat{\psi}^+(\hat{\psi}^+\hat{\psi})\hat{\psi})\right\}\mathrm{d}\boldsymbol{x} \tag{7.2.14}
$$

其中第一项代表动能，第二项即(7.2.8)式所表示的 BCS 有效相互作用，$\lambda<0$. 注意 Schrödinger 表象的算符 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$和 $\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x})$满足如下对易关系

$$
\begin{aligned}
&\{\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}')\} = \delta_{\alpha\beta}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\
&\{\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}')\} = \{\hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}')\} = 0
\end{aligned}
\tag{7.2.15}
$$

先求在 (7.2.14) 式类型的哈密顿量下，Heisenberg 算符 $\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)$及 $\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}^+(x)$所满足的方程式，这里

$$
x = (\boldsymbol{x}, t).
$$

大家知道，在 Heisenberg 表象中任何算符 $\hat{X}(t)$ 满足如下的运动方程

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\hat{X}(t) &= [\hat{X}(t), \hat{H}(t)] \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}[\hat{X}, \hat{H}]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}
\end{aligned}
\tag{7.2.16}
$$

仿(1.6.28)式的推导方法，在(7.2.14) 式的哈密顿量下可得算符 $\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)$及 $\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}^+(x)$所满足的运动方程为:

$$
\begin{aligned}
&\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m}\right)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x) - \lambda(\hat{\psi}_{\mathrm{H}}^+(x)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(x))\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x) = 0, \\
&\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\nabla^2}{2m}\right)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}^+(x) + \lambda\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}^+(x)(\hat{\psi}_{\mathrm{H}}^+(x)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(x)) = 0.
\end{aligned}
\tag{7.2.17}
$$

现在求 Green 函数所满足的方程. Green 函数的定义为:

$$
G_{\alpha\beta}(x, x') = -\mathrm{i}\langle\Psi_0|T(\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}^+(x'))|\Psi_0\rangle
$$

今后简写为

$$
G_{\alpha\beta}(x, x') = -\mathrm{i}\langle T(\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}^+(x'))\rangle \tag{7.2.18}
$$

利用(7.2.17)，仿(1.6.29)式的推导方法易于得到:

$$
\begin{aligned}
&\left\{\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m}\right\}G_{\alpha\beta}(x, x') + \mathrm{i}\lambda\langle T((\hat{\psi}_{\mathrm{H}}^+(x)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(x))\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}^+(x'))\rangle \\
&= \delta(x-x')\delta_{\alpha\beta}
\end{aligned}
\tag{7.2.19}
$$

由(7.2.19)可以看出，欲解 Green 函数 $G_{\alpha\beta}$ 就必须解决四个

场算符编时乘积的平均值. 对此,Gorkov 提出了如下的近似:

$$
\begin{aligned}
&\langle T(\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x_1)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}(x_2)\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\gamma}(x_3)\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\gamma\delta}(x_4))\rangle \\
=&-\langle T(\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x_1)\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\gamma}(x_3))\rangle\langle T(\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}(x_2)\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\delta}(x_4))\rangle \\
&+\langle T(\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x_1)\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\delta}(x_4))\rangle\langle T(\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}(x_2)\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\gamma}(x_3))\rangle \\
&+\langle N|T(\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x_1)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}(x_2))|N+2\rangle \\
&\times\langle N+2|T(\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\gamma}(x_3)\psi^+_{\mathrm{H}\delta}(x)_4|N\rangle
\end{aligned}
\tag{7.2.20}
$$

称(7.2.20)式为Gorkov假设. 这一假设把四个场算符的编时乘积之基态平均分解为算符 $\hat{\psi}_{\mathrm{H}}$ 与 $\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}}$的成对基态平均值之积的和. 按照第一章证明的 Wick 定理, 对于无相互作用着的电子系统可以作出这种分解, 而对于相互作用着的电子系统这是一种假设. 应该注意,在(7.2.20)式中于作配对平均时还考虑了 $\hat{\psi}_{\mathrm{H}}\hat{\psi}_{\mathrm{H}}$ 及 $\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}}\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}}$ 的贡献,这是和存在基态对束缚态相关的.

在 Gorkov 假设中的前两项都只涉及通常的 Green 函数, 而其第三项则不是如此. 我们从这一项引入反常 Green 函数, 易于看出

$$
\langle N|T(\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}(x'))|N+2\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_N-E_{N+2})t}F_{\alpha\beta}(x-x')
\tag{7.2.21'}
$$

$F_{\alpha\beta}$即由此式定义. 在无外场的均匀情况下, 如同正常 Green 函数一样,函数 $F_{\alpha\beta}$ 也只与坐标差 $x-x'$(包含 $t-t', \boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'$)有关. 另外,由于

$$
\mu=\frac{\partial E}{\partial N}
$$

所以

$$
\Delta E=\mu\Delta N
$$

于是

$$
E_{N+2}-E_N=2\mu
$$

代入(7.2.21′)可将反常 Green 函数F的定义式写为

$$\langle N|T(\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}(x'))|N+2\rangle=\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\mu t}F_{\alpha\beta}(x-x') \tag{7.2.21}$$

同理有

$$\langle N+2|T(\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}^{+}_{\mathrm{H}\beta}(x'))|N\rangle=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\mu t}F^{+}_{\alpha\beta}(x-x') \tag{7.2.22}$$

这作为 $F^{+}_{\alpha\beta}$ 的定义式.

将(7.2.20)式代入(7.2.19)式并注意到(7.2.18)、(7.2.21)及(7.2.22)式即得:

$$\begin{aligned}&\left\{\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla^2}{2m}\right\}G_{\alpha\beta}(x-x')-\mathrm{i}\lambda\frac{G_{\delta\delta}(0^-)}{-\mathrm{i}}\cdot\frac{G_{\alpha\beta}(x-x')}{-\mathrm{i}}\\&+\mathrm{i}\lambda\frac{G_{\delta\beta}(x-x')}{-\mathrm{i}}\cdot\frac{G_{\alpha\delta}(0^-)}{-\mathrm{i}}-\mathrm{i}\lambda F_{\alpha\delta}(0^+)F^{+}_{\delta\beta}(x-x')\\&=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta}\end{aligned} \tag{7.2.23}$$

其中 $F(0^+)$ 定义如下:

$$\begin{aligned}F_{\alpha\beta}(0^+)&=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\mu t}\langle N|\hat{\psi}_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}_{\mathrm{H}\beta}(x)|N+2\rangle\\&=\lim_{\substack{x\to x'\\ t\to t'+0}}F_{\alpha\beta}(x-x')\end{aligned} \tag{7.2.24}$$

(7.2.23)式又可写为

$$\begin{aligned}&\left\{\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mathrm{i}\lambda G_{\delta\delta}(0^-)-\mathrm{i}\lambda\hat{G}(0^-)\right\}\hat{G}(x-x')\\&\qquad-\mathrm{i}\lambda\hat{F}(0^+)\hat{F}^{+}(x-x')=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta}\end{aligned} \tag{7.2.25'}$$

这里在 Green 函数上打一符号“∧”表示对自旋变量 的矩阵表示。由(7.2.25′)可以看到,左方花括号内第三项和 第四项导致对化学势的附加修正,这没有重大意义, 今后我们将在各处略去这类项。于是(7.2.25′)式化为:

$$\left\{\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla^2}{2m}\right\}\hat{G}(x-x')-\mathrm{i}\lambda\hat{F}(0^+)\hat{F}^{+}(x-x')=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta} \tag{7.2.25}$$

同法可求出 $\hat{F}^{+}(x-x')$ 所满足的方程, 这要利 用(7.2.17)式的第二个方程,结果为

$$\left\{ \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\nabla^2}{2m}-2\mu \right\}\hat{F}^+(x-x')+\mathrm{i}\lambda\hat{F}^+(0^+)\hat{G}(x-x')=0$$

(7.2.26)

其中 $F^+_{\alpha\beta}(0^+)$ 的定义是:

$$F^+_{\alpha\beta}(0^+)=\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\mu t}\langle N+2|\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\alpha}(x)\hat{\psi}^+_{\mathrm{H}\beta}(x)|N\rangle \tag{7.2.27}$$

当电子间相互作用与其自旋无关时，根据自旋应守恒的道理可以断定:

$$\hat{G}_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}G(x-x') \tag{7.2.28}$$

另外，在 BCS 理论中电子束缚对是两电子对自旋的反对称波函数

$$S_{+\frac{1}{2}}S_{-\frac{1}{2}}-S_{-\frac{1}{2}}S_{+\frac{1}{2}}$$

这是单重态，它对自旋变量反对称. 于是可以预期 $\hat{F}$ 和 $\hat{F}^+$ 对自旋变量反对称，Gorkov 写为

$$\hat{F}^+(x-x')=\hat{I}F^+(x-x') \tag{7.2.29}$$

$$\hat{F}(x-x')=-\hat{I}F(x-x') \tag{7.2.30}$$

其中 $\hat{I}=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ 为反对称矩阵，而

$$\{F^+(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',0)\}^*=F(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',0) \tag{7.2.31}$$

利用(7.2.28)、(7.2.29)及(7.2.30)式代入(7.2.25)及(7.2.26)式，消去对自旋变量的依赖关系即得

$$\left\{ \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\nabla^2}{2m} \right\}G(x-x')-\mathrm{i}\lambda F(0^+)F^+(x-x')=\delta(x-x') \tag{7.2.32}$$

$$\left\{ \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\nabla^2}{2m}-2\mu \right\}F^+(x-x')+\mathrm{i}\lambda F^+(0^+)G(x-x')=0 \tag{7.2.33}$$

其中

$$\{F^+(0^+)\}^*=F(0^+) \tag{7.2.34}$$

称(7.2.32)及(7.2.33)式为 Gorkov 方程组.

三、动量能量表象中的 Gorkov 方程组

取(7.2.32)及(7.2.33)式中储量的傅里叶分量即得：

$$\left(\omega-\frac{p^2}{2m}\right)G(p)-\mathrm{i}\lambda F(0^+)F^+(p)=1 \tag{7.2.35}$$

$$\left(\omega+\frac{p^2}{2m}-2\mu\right)F^+(p)+\mathrm{i}\lambda F^+(0^+)G(p)=0 \tag{7.2.36}$$

若以化学势 μ 为独立变量，则相当于将上式中的 ω 用 $\omega'\equiv\omega-\mu$ 表示．由于 $\omega=\omega'+\mu$，于是上两式化为：

$$\left(\omega'-\left(\frac{p^2}{2m}-\mu\right)\right)G(p)-\mathrm{i}\lambda F(0^+)F^+(p)=1 \tag{7.2.35'}$$

$$\left(\omega'+\left(\frac{p^2}{2m}-\mu\right)\right)F^+(p)+\mathrm{i}\lambda F^+(0^+)G(p)=0 \tag{7.2.36'}$$

以后略去(7.2.35′)及(7.2.36′)式中的 ω' 右上角的一撇，且令

$$\xi\equiv\frac{p^2}{2m}-\mu \tag{7.2.37}$$

ξ 代表自化学势计起的动能．于是可写：

$$(\omega-\xi)G(p)-\mathrm{i}\lambda F(0^+)F^+(p)=1 \tag{7.2.38}$$

$$(\omega+\xi)F^+(p)+\mathrm{i}\lambda F^+(0^+)G(p)=0 \tag{7.2.39}$$

这就是在动量能量表象中的 Gorkov 方程组．我们看到，在这表象中此方程组易于求解，其解为

$$G(p)=\frac{\omega+\xi}{\omega^2-\xi^2-\Delta^2} \tag{7.2.40}$$

$$F^+(p)=-\mathrm{i}\lambda\frac{F^+(0^+)}{\omega^2-\xi^2-\Delta^2} \tag{7.2.41}$$

其中

$$\Delta^2=\lambda^2|F^+(0^+)|^2 \tag{7.2.42}$$

易于看出，(7.2.38)及(7.2.39)方程组左端的行列式在 $\omega=\pm\sqrt{\xi^2+\Delta^2}$ 处等于零，因此方程组的解只准确到下列形式的任

意项:

$$A_1(\boldsymbol{p})\delta(\omega-\varepsilon(\boldsymbol{p}))+A_2(\boldsymbol{p})\delta(\omega+\varepsilon(\boldsymbol{p})) \tag{7.2.43}$$

利用 Landau 关系(2.5.16)可以证明(7.2.40)加上(7.2.43)形式的任意项后解的形式为

$$G(p)=\frac{u_p^2}{\omega-\varepsilon(\boldsymbol{p})+\mathrm{i}\delta}+\frac{v_p^2}{\omega+\varepsilon(\boldsymbol{p})-\mathrm{i}\delta} \tag{7.2.44}$$

其中

$$\varepsilon(\boldsymbol{p})=\sqrt{\xi^2+\Delta^2} \tag{7.2.45}$$

$$u_p^2=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\xi}{\varepsilon(\boldsymbol{p})}\right),\qquad v_p^2=\frac{1}{2}\left(1-\frac{\xi}{\varepsilon(\boldsymbol{p})}\right) \tag{7.2.46}$$

让我们来验证(7.2.44)式. 当 $T\to0$ 时 Landau 关系化为

$$\mathrm{Re}G(\boldsymbol{p},\omega)=\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{Im}G(\boldsymbol{p},\omega')\mathrm{sign}\omega'}{\omega'-\omega}\mathrm{d}\omega'$$

利用下式

$$\frac{1}{x\pm\mathrm{i}\delta}=P\frac{1}{x}\mp\mathrm{i}\pi\delta(x) \tag{7.2.47}$$

自(7.2.44)式求出 $G(p)$ 的虚部代入上述 Landau 关系,再进行积分即可求得 ReG. 结果表明,它恰是自(7.2.44)式利用(7.2.47)求出的实部. 这就说明(7.2.44)确为解.

将(7.2.44)式的 $G(p)$ 解代入(7.2.38)式即得:

$$F^+(p)=-\mathrm{i}\lambda\frac{F^+(0^+)}{(\omega-\varepsilon(\boldsymbol{p})+\mathrm{i}\delta)(\omega+\varepsilon(\boldsymbol{p})-\mathrm{i}\delta)} \tag{7.2.48}$$

四、元激发谱

根据第一章所讲的 Green 函数极点理论可知, Green 函数(7.2.44)的正极点决定准粒子能谱:

$$\varepsilon(\boldsymbol{p})=\sqrt{\xi^2+\Delta^2} \tag{7.2.49}$$

此谱中有能隙 Δ 存在,由(7.2.42)决定. (7.2.42)中的 $F^+(0^+)$ 可

以用(7.2.48)式代入下式计算：

$$F^{+}(0^{+})=\frac{1}{(2\pi)^{4}}\int F^{+}(\boldsymbol{p})\mathrm{d}\boldsymbol{p}\mathrm{d}\omega \tag{7.2.50}$$

利用留数定理完成 $\mathrm{d}\omega$ 之积分后即得：

$$1=-\frac{\lambda}{2(2\pi)^{3}}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\sqrt{\xi^{2}+\Delta^{2}}} \tag{7.2.51}$$

能隙 Δ 即由(7.2.51)确定，称(7.2.51)式为能隙方程.

现在进一步计算积分(7.2.51). 若将积分中变数 $|\boldsymbol{p}|$ 的积分限自零取到无穷则积分发散. 然而，根据§7.1提出的 BCS 截断模型，只有在费密面附近，能量宽度为 $2\hbar\omega_c$ 的能量窄层内的电子态才参与超导电性. 取 $\hbar=1$ 单位制，并取 $\omega_c\approx\omega_D$(德拜频率)对(7.2.51)中之积分作能量截断则有

$$\begin{aligned}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\sqrt{\xi^{2}+\Delta^{2}}}&=\int\frac{1}{\sqrt{\xi^{2}+\Delta^{2}}}p^{2}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi\mathrm{d}p\\&=4\pi m p_{0}\int_{-\omega_D}^{+\omega_D}\frac{1}{\sqrt{\xi^{2}+\Delta^{2}}}\mathrm{d}\xi\\&=8\pi m p_{0}\ln\frac{\omega_D+\sqrt{\omega_D^{2}+\Delta^{2}}}{\Delta}\\&\approx 8\pi m p_{0}\ln\frac{2\omega_D}{\Delta}\end{aligned} \tag{7.2.52}$$

其中利用了

$$\xi=\frac{p^{2}}{2m}-\frac{p_{0}^{2}}{2m}\approx v_{0}(p-p_{0}) \tag{7.2.53}$$

$$p^{2}\mathrm{d}p\approx m p_{0}\mathrm{d}\xi \tag{7.2.54}$$

p_0，v_0 分别是在费密能处的动量及速度. 由(7.2.51)及(7.2.52)即得在 $T=0\mathrm{K}$ 下有：

$$\Delta=2\omega_D\exp\left\{-\frac{2\pi^{2}}{m p_{0}|\lambda|}\right\} \tag{7.2.55}$$

或写为

$$\Delta = 2\omega_{\mathrm{D}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\xi}} \tag{7.2.56}$$

其中 $\xi = \frac{m p_0}{2\pi^2}|\lambda|$. 这一公式与BCS理论中公式(7.1.23)相对应. (这里取了 $\hbar = 1$ 单位制,所以未出现因子 $\hbar$).

§7.3 $T>0$K 下的超导的 Green 函数理论

一、时空表象中的 Green 函数方程

考虑到(7.2.8)式,电子系统的哈密顿量可写为

$$\hat{H} = \int \mathrm{d}\boldsymbol{x} \hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x}) \left[\frac{\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c} \boldsymbol{A} \right)^2}{2m} - \mu \right] \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})$$

$$+ \frac{\lambda}{2} \int \mathrm{d}\boldsymbol{x} \hat{\psi}_\alpha^+(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}_\beta^+(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}) \tag{7.3.1}$$

其中 $\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$. 以下取 $\hbar = c = 1$ 单位制.

在 $T>0$K 时采用松原 Green 函数(见(2.1.10)式)现重新写为

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x, x') = -\langle T_\tau (\hat{\psi}_{K\alpha}(x) \hat{\psi}_{K\beta}^+(x')) \rangle \tag{7.3.2}$$

其中

$$x = (\boldsymbol{x}, \tau)$$

$$x' = (\boldsymbol{x}', \tau') \tag{7.3.3}$$

而

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N} \tag{7.3.4}$$

$\langle\cdots\rangle$表示对巨正则系综平均. 如(2.1.8)及(2.1.9)所表示的, $\hat{\psi}_{K\alpha}, \hat{\psi}_{K\alpha}^+$ 等是与“时间”τ 有关的、统计 Heisenberg 算符. 它们满足的运动方程可在(7.2.16)式中将 $it \to \tau$ 得到,即如

$$\frac{\partial \hat{\psi}_K(x)}{\partial \tau} = [\hat{H} - \mu \hat{N}, \hat{\psi}_K(x)] \tag{7.3.5}$$

在哈密顿量(2.1.13)下，$\hat{\psi}_{K\alpha}(\boldsymbol{x},\tau)$所满足的运动方程已见(2.1.16)式. 考虑到(7.2.7)式引入

$$V(x-x')=\lambda\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\delta(\tau-\tau') \tag{7.3.6}$$

则可将(2.1.16)式改写为

$$-\frac{\partial\hat{\psi}_{K\alpha}(x)}{\partial\tau}=\left(-\frac{\nabla^2}{2m}-\mu\right)\hat{\psi}_{K\alpha}(x)$$
$$+\left[\int\mathrm{d}x'\hat{\psi}^+_{K\gamma}(x')V(x-x')\hat{\psi}_{K\gamma}(x')\right]\hat{\psi}_{K\alpha}(x) \tag{7.3.7}$$

利用(7.3.6)及(7.3.7)式即可求得$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x,x')$所满足的方程为:

$$-\frac{\partial}{\partial\tau}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x,x')=\delta_{\alpha\beta}\delta(x-x')+\left[\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})^2-\mu\right]\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x,x')$$
$$+\lambda\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x,x;x,x') \tag{7.3.8}$$

其中

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'';\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}')\equiv-\langle T_\tau(\hat{\psi}_{K\alpha}(x)\hat{\psi}_{K\gamma}(x'')\hat{\psi}^+_{K\gamma}(x'')\hat{\psi}^+_{K\beta}(x'))\rangle \tag{7.3.9}$$

让我们来证明(7.3.8): 此小字处为简单起见,略去自旋下标未写,且设$\boldsymbol{A}=0$.

$$-\frac{\partial}{\partial\tau}\mathscr{G}(x,x')=\frac{\partial}{\partial\tau}\langle T_\tau(\hat{\psi}_K(x)\hat{\psi}^+_K(x'))\rangle$$

$$=\frac{\partial}{\partial\tau}\{\theta(\tau-\tau')\langle\hat{\psi}_K(x)\hat{\psi}^+_K(x')\rangle-\theta(\tau'-\tau)\langle\hat{\psi}^+_K(x')\hat{\psi}_K(x)\rangle\}$$

$$=\frac{\partial\theta(\tau-\tau')}{\partial\tau}\langle\hat{\psi}_K(x)\hat{\psi}^+_K(x')\rangle-\frac{\partial\theta(\tau'-\tau)}{\partial\tau}\langle\hat{\psi}^+_K(x')\hat{\psi}_K(x)\rangle$$

$$+\theta(\tau-\tau')\left\langle\frac{\partial\hat{\psi}_K(x)}{\partial\tau}\hat{\psi}^+_K(x')\right\rangle-\theta(\tau'-\tau)\left\langle\hat{\psi}^+_K(x')\frac{\partial\hat{\psi}_K(x)}{\partial\tau}\right\rangle$$

$$=\delta(\tau-\tau')\langle\hat{\psi}_K(x)\hat{\psi}^+_K(x')\rangle+\delta(\tau-\tau')\langle\hat{\psi}^+_K(x')\hat{\psi}_K(x)\rangle$$

$$+\theta(\tau-\tau')\left\langle\frac{\partial\hat{\psi}_K(x)}{\partial\tau}\hat{\psi}^+_K(x')\right\rangle-\theta(\tau'-\tau)\left\langle\hat{\psi}^+_K(x')\frac{\partial\hat{\psi}_K(x)}{\partial\tau}\right\rangle$$

$$=\delta(\tau-\tau')\langle\hat{\psi}_K(x)\hat{\psi}^+_K(x')+\hat{\psi}^+_K(x')\hat{\psi}_K(x)\rangle$$

$$+\left\langle T_\tau\left(\frac{\partial\hat{\psi}_K(x)}{\partial\tau}\hat{\psi}^+_K(x')\right)\right\rangle$$

$$=\delta(\tau-\tau')\,\mathrm{e}^{\hat{K}\tau}\langle\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\;\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}')+\hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\rangle\mathrm{e}^{-\hat{K}\tau}$$

$$+\left\langle T_\tau\left(\frac{\partial\hat{\psi}_K(x)}{\partial\tau}\hat{\psi}^+_K(x')\right)\right\rangle$$

$$=\delta(\tau-\tau')\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')+\left\langle T_\tau\left(\frac{\partial\hat{\psi}_K(x)}{\partial\tau}\hat{\psi}^+_K(x')\right)\right\rangle$$

$$=\delta(x-x')+\left\langle T_\tau\left(\frac{\partial\hat{\psi}_K(x)}{\partial\tau}\hat{\psi}^+_K(x')\right)\right\rangle \tag{7.3.10}$$

以(7.3.7)代入上式第二项再经计算，把结果再代回(7.3.10)即得：

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right)\mathscr{G}(x,x')=\delta(x-x')-\int\mathrm{d}x''V(x''-x)\mathscr{G}(x,x'';x'',x') \tag{7.3.11}$$

恢复自旋下标并考虑(7.3.6)式形式的相互作用则得在$\boldsymbol{A}\neq0$下 Green 函数所满足的(7.3.8)式.

仿§7.2,在$T>0$K下Gorkov假设:

$$\langle T_\tau(\hat{\psi}_{K\alpha}(x)\hat{\psi}_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^+_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^+_{K\beta}(x'))\rangle$$

$$=\langle T_\tau(\hat{\psi}_{K\alpha}(x)\psi^+_{K\beta}(x'))\rangle\langle T_\tau(\hat{\psi}_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^+_{K\gamma}(x))\rangle$$

$$-\langle T_\tau(\hat{\psi}_{K\alpha}(x)\psi^+_{K\gamma}(x))\rangle\langle T_\tau(\hat{\psi}_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^+_{K\beta}(x'))\rangle$$

$$+\langle T_\tau(\hat{\psi}_{K\alpha}(x)\hat{\psi}_{K\gamma}(x))\rangle\langle T_\tau(\hat{\psi}^+_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^+_{K\beta}(x'))\rangle \tag{7.3.12}$$

类似于§7.2中的讨论可知，(7.3.12)式右方第一和第二项与超导态没有实质性影响. (7.3.12)中第三项则反映了在超导态中电子对关联. 引入反常 Green 函数

$$\mathscr{F}^+_{\gamma\beta}(x,x')\equiv\langle T_\tau(\hat{\psi}^+_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^+_{K\beta}(x'))\rangle \tag{7.3.13}$$

$$\mathscr{F}_{\alpha\gamma}(x,x')\equiv\langle T_\tau(\hat{\psi}_{K\alpha}(x)\hat{\psi}_{K\gamma}(x'))\rangle \tag{7.3.14}$$

于是(7.3.8)可写为

$$-\frac{\partial}{\partial\tau}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x,x')=\delta_{\alpha\beta}\delta(x-x')+\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})^2\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x,x')$$

$$-\mu\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x,x')+\lambda\mathscr{F}_{\alpha\gamma}(x,x)\mathscr{F}^+_{\gamma\beta}(x,x') \tag{7.3.15}$$

在空间均匀情况下，$\mathscr{F}(x,\ x')$应只与$x-x'$有关(平移不变

性)，此时 $\mathscr{F}(x,x)$ 为常数．引入

$$\Delta_{\alpha\gamma}\equiv|\lambda|\mathscr{F}_{\alpha\gamma}(0^{+}) \tag{7.3.16}$$

得无磁场下松原格林函数满足的方程为

$$\left\{-\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right\}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x-x')+\Delta_{\alpha\gamma}\mathscr{F}^{+}_{\gamma\beta}(x-x')=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta} \tag{7.3.17}$$

类似于对(7.3.8)式的推导即得出$\mathscr{F}^{+}$所满足的方程:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\tau}\mathscr{F}^{+}_{\alpha\beta}(x,\ x')=&\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2\mathscr{F}^{+}_{\alpha\beta}(x,x')-\mu\mathscr{F}^{+}_{\alpha\beta}(x,x')\\&-\lambda\{\langle T_{\tau}(\hat{\psi}^{+}_{K\alpha}(x)\hat{\psi}_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^{-}_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^{+}_{K\beta}(x'))\rangle\}\end{aligned} \tag{7.3.18}$$

对上式右方最后一项假设

$$\begin{aligned}&\langle T_{\tau}(\hat{\psi}^{+}_{K\alpha}(x)\psi_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^{+}_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^{+}_{K\beta}(x'))\rangle\\&=-\langle T_{\tau}(\hat{\psi}^{+}_{K\alpha}(x)\hat{\psi}^{+}_{K\gamma}(x))\rangle\langle T_{\tau}(\hat{\psi}_{K\gamma}(x)\hat{\psi}^{+}_{K\beta}(x'))\rangle\end{aligned} \tag{7.3.19}$$

在无外磁场下最后得出的方程为:

$$\left\{\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right\}\mathscr{F}^{+}_{\alpha\beta}(x-x')-\Delta^{*}_{\alpha\gamma}\mathscr{G}_{\gamma\beta}(x-x')=0 \tag{7.3.20}$$

其中

$$\Delta^{*}_{\alpha\gamma}=|\lambda|\mathscr{F}^{+}_{\alpha\gamma}(0^{+}) \tag{7.3.21}$$

(7.3.17)及(7.3.20)式即是在 $\boldsymbol{A}=0$，$T>0\mathrm{K}$ 下的 Gorkov 方程组.

不难将上述方程组推广到 $\boldsymbol{A}\neq0$ 的情况，结果为:

$$\begin{aligned}\left\{-\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}-\mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2+\mu\right\}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x,x')+\Delta_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{x})\mathscr{F}^{+}_{\gamma\beta}(x,\ x')\\=\delta(x-x')\delta_{\alpha\beta}\end{aligned} \tag{7.3.22}$$

其中

$$\Delta_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{x})=|\lambda|\mathscr{F}_{\alpha\gamma}(x,x) \tag{7.3.23}$$

易于看出 $\mathscr{F}(x,x)$ 与 τ 无关．另一方程为

$$\left\{\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}+\mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2+\mu\right\}\mathscr{F}^+_{\alpha\beta}(x,x')-\Delta^*_{\alpha\gamma}(x)\mathscr{G}_{\gamma\beta}(x,x')$$
$$=0. \tag{7.3.24}$$

其中

$$\Delta^*_{\alpha\gamma}(x)=|\lambda|\mathscr{F}^+_{\alpha\gamma}(x,x) \tag{7.3.25}$$

本节下面只考虑空间均匀情况,这时 $\mathscr{G}$, $\mathscr{F}$, $\mathscr{F}^+$ 均只为 $x-x'$ 的函数,而 Δ,Δ^* 与 $\boldsymbol{x}$ 无关.

二、变换到动量能量表象

现在将方程(7.3.17)及(7.3.20)转换到动量能量表象. 为此需将格林函数作傅里叶变换,这里只讨论无外磁场情况. 按照(2.3.8)及(2.3.10)式这可写为

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}(x,x')=T\sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n(\tau-\tau')}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{p},\omega_n) \tag{7.3.26}$$

$$\mathscr{F}^+_{\gamma\beta}(x,x')=T\sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n(\tau-\tau')}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\mathscr{F}^+_{\gamma\beta}(\boldsymbol{p},\omega_n) \tag{7.3.27}$$

其中 $\omega_n=(2n+1)\pi T$. 注意到在空间均匀情况下 Δ 为常数,并考虑到下列关系式

$$\delta(x-x')=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\delta(\tau-\tau')=T\sum \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n(\tau-\tau')}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} \tag{7.3.28}$$

完成(7.3.17)式中$\frac{\partial}{\partial\tau}$,$\nabla^2$ 等对(7.3.26)的运算即得:

$$(\mathrm{i}\omega_n-\xi)\mathscr{G}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{p},\omega_n)+\Delta_{\alpha\gamma}\mathscr{F}^+_{\gamma\beta}(\boldsymbol{p},\omega_n)=\delta_{\alpha\beta} \tag{7.3.29}$$

其中

$$\xi=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\mu \tag{7.3.30}$$

它是从化学势 μ 计起的能量. 同法可将(7.3.20)转变到傅里叶表象中:

$$(\mathrm{i}\omega_n+\xi)\mathscr{F}^+_{\alpha\beta}(\boldsymbol{p},\omega_n)+\Delta^*_{\alpha\gamma}\mathscr{G}_{\gamma\beta}(\boldsymbol{p},\omega_n)=0 \tag{7.3.31}$$

(7.3.29)及(7.3.31)为矩阵方程,可写为:

$$(\mathrm{i}\omega_n-\xi)\begin{pmatrix}\mathscr{G}_{11} & \mathscr{G}_{12}\\ \mathscr{G}_{21} & \mathscr{G}_{22}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\Delta_{11} & \Delta_{12}\\ \Delta_{21} & \Delta_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathscr{F}^+_{11} & \mathscr{F}^+_{12}\\ \mathscr{F}^+_{21} & \mathscr{F}^+_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} \tag{7.3.29'}$$

$$(\mathrm{i}\omega_n+\xi)\begin{pmatrix}\mathscr{F}^+_{11} & \mathscr{F}^+_{12}\\ \mathscr{F}^+_{21} & \mathscr{F}^+_{22}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\Delta^*_{11} & \Delta^*_{12}\\ \Delta^*_{21} & \Delta^*_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathscr{G}_{11} & \mathscr{G}_{12}\\ \mathscr{G}_{21} & \mathscr{G}_{22}\end{pmatrix}=0. \tag{7.3.31'}$$

以上 $\alpha=1$ 表示自旋向上,$\alpha=2$ 表示自旋向下.

根据 Fermi 子算符反对易可知 $\Delta_{\alpha\beta}$ 满足

$$\Delta_{\alpha\beta}=-\Delta_{\beta\alpha} \tag{7.3.32}$$

据(7.3.32)即可写:

$$\begin{pmatrix}\Delta_{11} & \Delta_{12}\\ \Delta_{21} & \Delta_{22}\end{pmatrix}=-\Delta\begin{pmatrix}0 & +1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\equiv-\Delta\hat{I} \tag{7.3.33}$$

其中矩阵 $\hat{I}$ 的定义是

$$\hat{I}=\begin{pmatrix}0 & +1\\ -1 & 0\end{pmatrix} \tag{7.3.34}$$

而对 $\Delta^*_{\alpha\beta}$ 可写

$$\begin{pmatrix}\Delta^*_{11} & \Delta^*_{12}\\ \Delta^*_{21} & \Delta^*_{22}\end{pmatrix}=\Delta^*\begin{pmatrix}0 & +1\\ -1 & 0\end{pmatrix}=\Delta^*\hat{I} \tag{7.3.35}$$

(7.3.33)与(7.3.35)右方差一负号,这是因为存在下列关系:

$$\mathscr{F}^+_{\alpha\beta}(x,x)=-(\mathscr{F}_{\alpha\beta}(x,x))^* \tag{7.3.36}$$

所以按 $\Delta_{\alpha\gamma}$, $\Delta^*_{\alpha\gamma}$ 的定义式(7.3.23)及(7.3.25)式看出应有这一负号.

类似于(7.2.29)的考虑有:

$$\mathscr{F}^{+}_{\alpha\beta}=\mathscr{F}^{+}\hat{I}_{\alpha\beta} \tag{7.3.37}$$

以(7.3.33)及(7.3.37)式代入(7.3.29)式左方第二项,注意到

$$-\hat{I}\hat{I}=\hat{E} \tag{7.3.38}$$

$$\hat{E}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} \tag{7.3.39}$$

以及

$$\mathscr{G}_{\alpha\beta}=\mathscr{G}\hat{E}_{\alpha\beta} \tag{7.3.40}$$

即可将(7.3.29)式(或(7.3.29′)式)写为

$$(\mathrm{i}\omega_n-\xi)\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\omega_n)+\Delta\mathscr{F}^{+}(\boldsymbol{p},\omega_n)=1 \tag{7.3.41}$$

同理可将(7.3.31)化为

$$(\mathrm{i}\omega_n+\xi)\mathscr{F}^{+}(\boldsymbol{p},\omega_n)+\Delta^{*}\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\omega_n)=0 \tag{7.3.42}$$

解方程组(7.3.41)及(7.3.42)即得:

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{p},\ \omega_n)=-\frac{\mathrm{i}\omega_n+\xi}{\omega_n^2+\xi^2+\Delta^2} \tag{7.3.43}$$

$$\mathscr{F}^{+}(\boldsymbol{p},\ \omega_n)=\frac{\Delta^{*}}{\omega_n^2+\xi^2+\Delta^2} \tag{7.3.44}$$

在无外磁场时,我们取 $\mathscr{F}^{+}(0^{+})$ 为实数,因而可取Δ 也是实数,$\Delta=\Delta^{*}$.

三、能隙方程

由第二章所讲的理论，用松原格林函数的解析延拓即可求得推迟格林函数 $G^{\mathrm{R}}(\omega)$. 而按照 $G^{\mathrm{R}}(\mathrm{i}\omega_n)=\mathscr{G}(\omega_n)$(见第二章)由(7.3.43)即得元激发能谱为

$$\varepsilon(\boldsymbol{p})=\sqrt{\xi^2+\Delta^2} \tag{7.3.45}$$

能隙由下式确定:

$$\begin{aligned}\Delta^{*}&=|\lambda|\mathscr{F}^{+}(x,x)\\&=|\lambda|T\sum_{\omega_n}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\mathscr{F}^{+}(\boldsymbol{p},\omega_n)\end{aligned}$$

$$=|\lambda|\Delta^{*}T\sum_{\omega_n}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{\omega_n^2+\xi^2+\Delta^2}$$

即

$$1=|\lambda|T\sum_{n}\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{\omega_n^2+\xi^2+\Delta^2}\tag{7.3.46}$$

此即能隙方程．利用留数定理将上式中对频率的求和可化为复平面回路积分：

$$T\sum_{n}\frac{1}{\omega_n^2+\xi^2+\Delta^2}=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\frac{1}{\varepsilon+z}\,\frac{1}{\varepsilon-z}\,\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{e}^{\beta Z}+1}$$

注意$(\mathrm{e}^{\beta Z}+1)^{-1}$有一系列极点$z=\mathrm{i}\omega_n=\mathrm{i}(2n+1)\pi T$．$(n=\cdots-2,-1,0,1,2,\cdots)$，上式右方积分回路如图 7.4 所示．使回路变形再

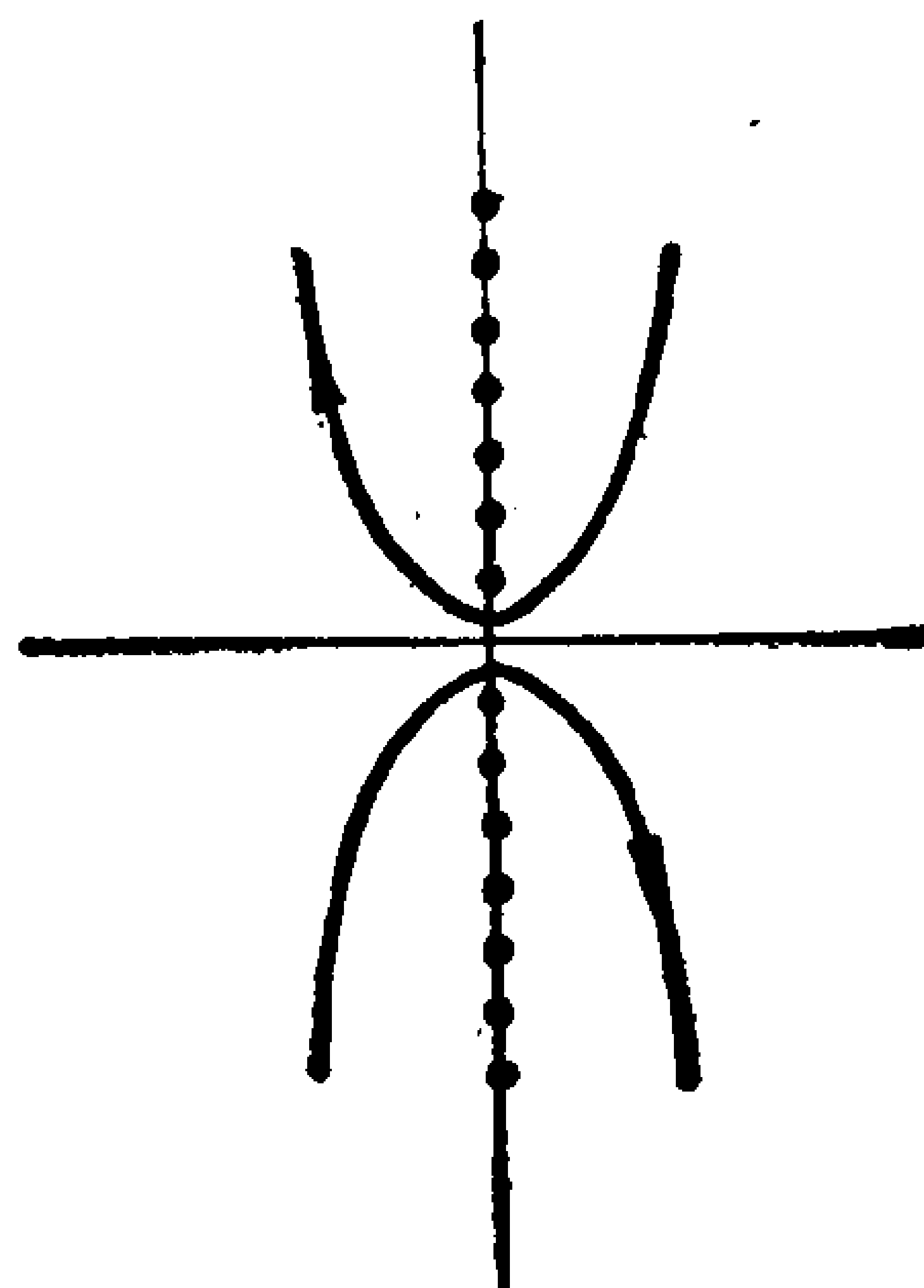


图 7.4　复 z 平面

使用留数定理即得

$$T\sum_{n}\frac{1}{\omega_n^2+\xi^2+\Delta^2}=\frac{1}{2\varepsilon}\tanh\left(\frac{\varepsilon}{2T}\right)$$

以此代回(7.3.46)式即得：

$$1=|\lambda|\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{2\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}\tanh\left(\frac{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}{2T}\right)\tag{7.3.47}$$

利用(7.2.53)及(7.2.54)式，并对 ξ 采取 BCS 截断即得:

$$1=\frac{|\lambda| m p_0}{2\pi^2}\int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh\frac{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}{2T}}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}} \tag{7.3.48}$$

解此能隙方程即可求 Δ 与温度之关系. 我们将在下节再讨论这个问题.

§7.4 超导体热学性质

一、超导转变温度

在超导转变温度(T_c)处，$\Delta(T_c)=0$，故(7.3.48)化为:

$$1=\frac{|\lambda| m p_0}{2\pi^2}\int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh\frac{\xi}{2T_c}}{\xi} \tag{7.4.1}$$

为求出 T_c 的表达式，对上面积分作换元，令:

$$x=\frac{\xi}{2T_c}$$

先对 $\int \tanh x \, d\ln x$ 作分部积分，再利用下列积分公式

$$\int_0^{\infty} \frac{\ln x}{\cosh^2\frac{x}{2}} dx = 2\left[\psi\left(\frac{1}{2}\right)+\ln 2\pi\right] \tag{7.4.2}$$

$\left(\text{其中Psi函数 } \psi\left(\frac{1}{2}\right)=-c-2\ln 2, \ln\gamma=c=-\psi(1)=0.57721566\right)$

可得

$$\int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh\left(\frac{\xi}{2T_c}\right)}{\xi} \approx \ln\frac{\omega_D}{2T_c}\frac{4\gamma}{\pi} \tag{7.4.3}$$

代入(7.4.1)即得:

$$1=\frac{|\lambda| m p_0}{2\pi^2}\ln\frac{\omega_D}{2T_c}\frac{4\gamma}{\pi}$$

即

$$T_c = 2\omega_D \frac{\gamma}{\pi} \exp\left\{-\frac{2\pi^2}{mp_0}\frac{1}{|\lambda|}\right\} \tag{7.4.4}$$

或改为

$$T_c = 2\omega_D \frac{\gamma}{\pi} \exp\left\{-\frac{1}{N(0)|\lambda|}\right\} \tag{7.4.4'}$$

其中 $N(0)=\frac{mp_0}{2\pi^2}$是自由电子模型下的态密度.

二、能隙与温度的关系

1. $T \ll T_c$ 时的情况

令

$$\xi = |\lambda| \frac{mp_0}{2\pi^2} \tag{7.4.5}$$

则可将(7.3.48)式写为

$$\frac{1}{\xi} = \int_0^{\omega_D} \mathrm{d}\xi \frac{\tanh\frac{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}{2T}}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}} \tag{7.4.6}$$

$$= \int_0^{\omega_D} \mathrm{d}\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}\left(1-\frac{2}{\mathrm{e}^{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}/T}+1}\right)$$

$$= \int_0^{\omega_D} \mathrm{d}\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}} - 2\int_0^{\omega_D} \frac{\mathrm{d}\xi}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}} \frac{1}{\mathrm{e}^{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}/T}+1} \tag{7.4.7}$$

由(7.2.51)及(7.2.52)式有

$$\frac{1}{\xi} = \int_0^{\omega_D} \frac{\mathrm{d}\xi}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2(0)}} \approx \ln\frac{2\omega_D}{\Delta(0)}$$

其中 $\Delta(0)$为 $T=0\mathrm{K}$ 下的能隙. 由此式可定 ξ, 代入(7.4.7)之左方，于是有:

$$-\ln\frac{2\omega_D}{\Delta(0)}+\ln\frac{2\omega_D}{\Delta(T)}=2\int_0^{\omega_D}\frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2(T)}}\frac{1}{e^{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}/T}+1}$$

或写为

$$\ln\frac{\Delta(0)}{\Delta(T)}=2\int_0^{\omega_D}\frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2(T)}}\frac{1}{e^{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}/T}+1}$$

$$=2\int_\Delta^\infty\frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2-\Delta^2(T)}}\frac{1}{e^{\varepsilon/T}+1}$$

$$=2\int_0^\infty d\varphi\ \frac{\Delta\sinh\varphi}{[\Delta\sqrt{(\cosh\varphi)^2-1}][e^{\frac{\Delta\cosh\varphi}{h}}+1]}$$

其中已令 $\epsilon=\sqrt{\xi^2+\Delta^2}$, $\varepsilon=\Delta\cosh\varphi$. 将上式整理后作 Taylor 级数展开即得

$$\ln\frac{\Delta(0)}{\Delta(T)}=2\int_0^\infty d\varphi\sum_{m=1}^\infty(-1)^{m+1}\exp\left\{-\frac{m\Delta}{T}\cosh\varphi\right\}$$

$$=2\sum_{m=1}^\infty(-1)^{m+1}K_0\left(\frac{m\Delta}{T}\right) \tag{7.4.8}$$

其中使用了虚变量 Bessel 函数的积分表达式

$$K_\nu(z)=\int_0^\infty e^{-z\cosh u}\cosh\nu u\,du,\quad R(Z)>0,\ \nu\text{ 任意} \tag{7.4.9}$$

在 $T\ll T_c$ 条件下有 $T\ll\Delta$, 即(7.4.8)式中 K_0 的宗量值很大. 利用 Bessel 函数的渐近展开

$$K_0(z)\approx\left(\frac{\pi}{2Z}\right)^{\frac{1}{2}}e^{-z}\left(1-\frac{1}{8Z}+\frac{9}{128Z^3}\cdots\right) \tag{7.4.10}$$

在(7.4.8)式中只取 $m=1$ 的项,并注意到

$$\ln\frac{\Delta(0)}{\Delta}=\ln\left(1+\frac{\Delta(0)-\Delta}{\Delta}\right)\approx\frac{\Delta(0)-\Delta}{\Delta}$$

则得到

$$\frac{\Delta(0)-\Delta}{\Delta}\approx 2\left(\frac{\pi T}{2\Delta}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\Delta/T}\left(1-\frac{T}{8\Delta}\right)$$

或再取近似写为

$$\frac{\Delta(0)-\Delta}{\Delta(0)}\approx 2\left(\frac{\pi T}{2\Delta(0)}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\Delta(0)/T}\left(1-\frac{T}{8\Delta(0)}\right)$$

即

$$\Delta=\Delta(0)-\sqrt{2\pi T\Delta(0)}\,\mathrm{e}^{-\Delta(0)/T}\left(1-\frac{T}{8\Delta(0)}\right) \tag{7.4.11}$$

2. $T\approx T_c$ 时的情况

(7.3.46)式可写为

$$\frac{1}{\zeta}=T\sum_n\int_{-\omega_D}^{\omega_D}\frac{\mathrm{d}\xi}{\omega_n^2+\xi^2+\Delta^2} \tag{7.4.12}$$

ζ 由(7.4.5)决定．在 $T\approx T_c$ 时$\frac{\Delta}{T}\ll 1$，所以可按$\frac{\Delta}{T}$展开上式

$$\begin{aligned}\frac{1}{\zeta}&=T\sum_n\int_{-\omega_D}^{\omega_D}\mathrm{d}\xi\,\frac{1}{\omega^2+\xi^2}\left[\frac{1}{1+\frac{\Delta^2}{\omega^2+\xi^2}}\right]\\&=T\sum_n\int_{-\omega_D}^{\omega_D}\mathrm{d}\xi\left[\frac{1}{\omega^2+\xi^2}-\frac{\Delta^2}{(\omega^2+\xi^2)^2}+\frac{\Delta^4}{(\omega^2+\xi^2)^3}+\cdots\right]\\&=\int_0^{\omega_D}\frac{\mathrm{d}\xi}{\xi}\tanh\frac{\xi}{2T}+T\sum_n\int_{-\omega_D}^{\omega_D}\mathrm{d}\xi\left[-\frac{\Delta^2}{(\omega^2+\xi^2)^2}\right.\\&\quad\left.+\frac{\Delta^4}{(\omega^2+\xi^2)^3}+\cdots\right]\end{aligned}$$

上式右方第二项积分收敛，将积分限取为无穷大，进行分部积分并利用下列关系式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{(x^2+1)^n}=\frac{(2n-2)!}{[(n-1)!]^2}\frac{\pi}{2^{2n-2}}$$

经整理后可得

$$\frac{1}{\zeta}=\int_0^{\omega_D}\frac{d\xi}{\xi}\tanh\frac{\xi}{2T}-\left(\frac{\Delta}{\pi T}\right)^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)^3}$$
$$+\frac{3}{4}\left(\frac{\Delta}{\pi T}\right)^4\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)^5} \tag{7.4.13}$$

利用 Rieman ζ 函数

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)^z}=\frac{2^z-1}{2^z}\zeta(z) \tag{7.4.14}$$

则(7.4.13)可写为

$$\frac{1}{\zeta}=\int_0^{\omega_D}\frac{d\xi}{\xi}\tanh\frac{\xi}{2T}-\left(\frac{\Delta}{\pi T}\right)^2\frac{7}{8}\zeta(3)+\frac{3}{4}\left(\frac{\Delta}{\pi T}\right)^4\frac{31}{32}\zeta(5) \tag{7.4.15}$$

当 $T=T_c$ 时 $\Delta=0$，上式化为

$$\frac{1}{\zeta}=\int_0^{\omega_D}\frac{d\xi}{\xi}\tanh\frac{\xi}{2T_c}=\ln\frac{2\omega_D\gamma}{\pi T_c} \tag{7.4.16}$$

由(7.4.15)及(7.4.16)式可写:

$$\ln\frac{T}{T_c}=-\frac{7}{8}\zeta(3)\left(\frac{\Delta}{\pi T}\right)^2+\frac{93}{128}\zeta(5)\left(\frac{\Delta}{\pi T}\right)^4+\cdots \tag{7.4.17}$$

当极靠近 T_c 时可取一级近似得:

$$\ln\frac{T}{T_c}\approx\frac{T-T_c}{T_c}\approx-\frac{7}{8}\zeta(3)\left(\frac{\Delta}{\pi T_c}\right)^2$$

所以

$$\Delta\approx\pi T_c\sqrt{\frac{8}{7\zeta(3)}}\sqrt{1-\frac{T}{T_c}}\approx 3.06T_c\sqrt{1-\frac{T}{T_c}} \tag{7.4.18}$$

三、低温下超导体的热力学性质

在 § 2-1 讲过用松原格林函数决定热力学性质的方法. 系统的热力学势可表示为(见(2.1.26)式)

$$\Omega-\Omega_0=\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\langle\lambda\hat{H}_I\rangle \tag{7.4.19}$$

根据(7.2.8)式超导相互作用的 $\hat{H}_{\mathrm{I}}$ 为:

$$\hat{H}_{\mathrm{I}}=\frac{\lambda}{2}\int \mathrm{d}^3x\hat{\psi}_\alpha^+(x)\hat{\psi}_\beta^+(x)\hat{\psi}_\beta(x)\hat{\psi}_\alpha(x)$$

其中$\lambda<0$. 上式中的 λ 本不是(7.4.19)式中 的 正 比因子 λ, 当然(7.2.8)式中的 λ 可以起正比因子的作用, 于是有:

$$\begin{aligned}\frac{\delta\Omega}{\delta|\lambda|}&=-\frac{1}{\lambda}\frac{\lambda}{2}\int \mathrm{d}^3x\langle\hat{\psi}_\alpha^+(x)\hat{\psi}_\beta^+(x)\hat{\psi}_\beta(x)\hat{\psi}_\alpha(x)\rangle\\&=-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\langle T_\tau(\hat{\psi}_{k\alpha}^+(x_1)\hat{\psi}_{k\beta}^+(x_2)\hat{\psi}_{k\beta}(x_3)\hat{\psi}_{k\alpha}(x_4))\rangle\Big|_{\substack{x_1=x_2\\=x_3=x_4\\\tau_1=\tau_2+0\\\tau_2=\tau_3+0\\\tau_3=\tau_4+0}}\\&=-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\langle T_\tau(\hat{\psi}_{k\alpha}^+(x_1)\hat{\psi}_{k\beta}^+(x_2))\rangle\langle T_\tau(\hat{\psi}_{k\beta}(x_3)\hat{\psi}_{k\alpha}(x_4))\rangle\\&=-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\mathscr{F}_{\alpha\beta}^+(0^+)\mathscr{F}_{\beta\alpha}(0^+)=-\frac{1}{|\lambda|^2}|\Delta|^2\end{aligned}$$

注意到(7.4.7)式所表示的、当温度一定时$\frac{1}{|\lambda|}$和Δ的关系, 我们

得
$$\frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}\Delta}=\left(\frac{\mathrm{d}\frac{1}{|\lambda|}}{\mathrm{d}\Delta}\right)\Delta^2$$

由此得到单位体积金属的热力学势在超导态与正常态之差为:

$$\Omega_s-\Omega_{\mathrm{N}}=\int_0^\Delta\frac{\mathrm{d}\frac{1}{|\lambda|}}{\mathrm{d}\Delta}\Delta^2\mathrm{d}\Delta \tag{7.4.20}$$

为计算$\Omega_s-\Omega_{\mathrm{N}}$, 关键是要计算$\frac{1}{|\lambda|}$与$\Delta$的函数关系. 注意到(7.4.7)式, 采用与推导(7.4.8)式同样的算法可得:

$$\frac{1}{\zeta}=\ln\frac{2\omega_{\mathrm{D}}}{\Delta}-2\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}K_0\left(\frac{n\Delta}{T}\right)$$

注意到(7.4.5)式将上式改写为:

$$\frac{1}{|\lambda|}=\frac{mp_0}{2\pi^2}\left\{\ln\frac{2\omega_D}{\Delta}-2\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}K_0\left(\frac{n\Delta}{T}\right)\right\} \tag{7.4.21}$$

此即所求的$\frac{1}{|\lambda|}$随 Δ 的函数关系

以(7.4.21)代入(7.4.20)式，再注意到下列公式

$$K_0'(x)=-K_1(x) \tag{7.4.22}$$

即有:

$$\Omega_s-\Omega_N=\int_0^{\Delta}\frac{mp_0}{2\pi^2}\left\{-\frac{1}{\Delta}-2\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\left(-\frac{n}{T}\right)K_1\left(\frac{n\Delta}{T}\right)\right\}\Delta^2\mathrm{d}\Delta$$

$$=-\frac{mp_0}{2\pi^2}\left\{\frac{\Delta^2}{2}-2\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\left(\frac{T}{n}\right)^2\int_0^{\frac{n\Delta}{T}}K_1(x)x^2\mathrm{d}x\right\}$$

其中

$$x=\frac{n\Delta}{T}$$

利用

$$\int_0^{\infty}K_1(x)x^2\mathrm{d}x=2$$

上式又可写为

$$\Omega_s-\Omega_N=-\frac{mp_0}{2\pi^2}\left\{\frac{\Delta^2}{2}-4\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\left(\frac{T}{n}\right)^2+2\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\left(\frac{T}{n}\right)^2\int_{\frac{n\Delta}{T}}^{\infty}K_1(x)x^2\mathrm{d}x\right\} \tag{7.4.23}$$

在低温极限下 $\Delta\gg T$，对上式花括号内的积分只需保留 $n=1$ 的项．使用渐近式表示:

$$K_1(x)\approx-\left(\frac{\pi}{2}\right)^{\frac{1}{2}}x^{-\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-x}-\left(\frac{\pi}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{3}{8}x^{-\frac{3}{2}}\ \mathrm{e}^{-x}\qquad(7.4.24)$$

可以算出

$$2T^2\int_{\frac{\Delta}{T}}^{\infty}K_1(x)x^2\mathrm{d}x\approx\sqrt{2\pi T\Delta(0)^3}\left(1+\frac{15}{8}\frac{T}{\Delta(0)}\right)\mathrm{e}^{-\Delta(0)/T}\qquad(7.4.25)$$

再注意到

$$4T^2\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\frac{1}{n^2}=4T^2\frac{\pi^2}{12}=\frac{1}{3}\pi^2T^2\qquad(7.4.26)$$

将(7.4.25)及(7.4.26)式代入(7.4.23)式后即得在$T\ll\Delta$条件下的近似式:

$$\Omega_s-\Omega_N=\frac{1}{6}mp_0T^2-\frac{mp_0}{2\pi^2}\left[\frac{\Delta^2}{2}+\sqrt{2\pi T\Delta(0)^3}\left(1+\frac{15}{8}\frac{T}{\Delta(0)}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\Delta(0)}{T}}\right]\qquad(7.4.27)$$

其中第二项就是由引起超导的相互作用(7.2.8)所导致的修正项.易于看出,对于热力学函数自由能(F)这个修正项是一样的,只是其中的Δ应理解为T,V,N的函数.①于是可有:

$$F_s-F_N=\frac{1}{6}mp_0T^2-\frac{mp_0}{2\pi^2}\left\{\frac{\Delta^2}{2}+\sqrt{2\pi T\Delta(0)^3}\left(1+\frac{15}{8}\frac{T}{\Delta(0)}\right)\mathrm{e}^{-\Delta(0)/T}\right\}\qquad(7.4.28)$$

由(7.4.28)可有:

$$F_N=-\frac{mp_0T^2}{6}+\text{常数}\qquad(7.4.29)$$

$$F_s=-\frac{mp_0}{2\pi^2}\left[\frac{\Delta^2}{2}+\sqrt{2\pi T\Delta(0)^3}\left(1+\frac{15}{8}\frac{T}{\Delta(0)}\right)\mathrm{e}^{-\Delta(0)/T}\right]+\text{常数}\qquad(7.4.30)$$

---

① 这是因为,与(2.1.26)式的证明类似,可以证明$\frac{\partial F}{\partial\lambda}=\frac{1}{\lambda}\langle\lambda\hat{H}_1\rangle$,这里$\langle\cdots\rangle$表示正则系综平均.

近似取 $\Delta\frac{\partial\Delta}{\partial T}\approx\Delta_0\frac{\partial\Delta}{\partial T}$ 并利用(7.4.11)式可得:

$$S_s=-\frac{\partial F_s}{\partial T}\approx\frac{mp_0}{\pi^2}\sqrt{\frac{2\pi\Delta(0)^3}{T}}\mathrm{e}^{-\Delta(0)/T}\quad,(T\ll\Delta)\tag{7.4.31}$$

而

$$c_s=T\frac{\partial S_s}{\partial T}\approx\frac{mp_0}{\pi^2}\sqrt{\frac{2\pi\Delta(0)^5}{T^3}}\mathrm{e}^{-\Delta(0)/T},\ (T\ll\Delta)\tag{7.4.32}$$

由(7.4.29)有:

$$c_{\mathrm{N}}(T)=\frac{mp_0}{3}T\tag{7.4.33}$$

由(7.4.32)及(7.4.33)式可得:

$$\frac{c_s(T)}{c_{\mathrm{N}}(T_c)}=\frac{3}{\gamma}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\Delta(0)}{T}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\Delta(0)/T}\tag{7.4.34}$$

其中利用了由(7.2.55)及(7.4.4)式所得出的下列关系:

$$\frac{\Delta(0)}{T_c}=\frac{\pi}{\gamma}\tag{7.4.35}$$

其中 $\ln\gamma=C=0.57721566$.

四、接近超导转变温度时的热力学性质

为求得 $\frac{1}{|\lambda|}$ 与 Δ 的函数关系,这时要利用(7.4.12)式

$$\frac{1}{\zeta}=T\sum_n\int_{-\omega_D}^{\omega_D}\frac{\mathrm{d}\xi}{\omega_n^2+\xi^2+\Delta^2}.$$

作 $\left(\frac{\Delta}{T}\right)$ 的幂级数展开,类似于求(7.4.17)式的计算即得:

$$\frac{1}{|\lambda|}=\frac{mp_0}{2\pi^2}\left[\ln\left(\frac{\omega_D\gamma}{\pi T_c}\right)-\frac{7\zeta(3)}{8}\left(\frac{\Delta}{\pi T}\right)^2+\frac{93\zeta(5)}{128}\left(\frac{\Delta}{\pi T}\right)^4+\cdots\right]\tag{7.4.36}$$

准确到 Δ^2 项可得:

$$F_s - F_N = \int_0^{\Delta} \frac{\mathrm{d}\frac{1}{|\lambda|}}{\mathrm{d}\Delta} \Delta^2 \mathrm{d}\Delta \approx -\frac{mp_0}{2\pi^2} \frac{7\zeta(3)}{(2\pi T)^2} \int_0^{\Delta} \Delta^3 \mathrm{d}\Delta$$

$$= -\frac{mp_0}{8\pi^2} \frac{7\zeta(3)}{(2\pi T)^2} \Delta^4 \tag{7.4.37}$$

以(7.4.18)式的 Δ 代入即得:

$$F_s - F_N = -\frac{2mp_0 T_c^2}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2 \tag{7.4.38}$$

于是得:

$$S_s - S_N = -\frac{4mp_0 T_c}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \tag{7.4.39}$$

而在 $T = T_c$ 处的比热容跳跃为

$$(c_s - c_N)|_{T_c} = \frac{4mp_0 T_c}{7\zeta(3)} \tag{7.4.40}$$

如果在计算 $\mathrm{d}|\lambda|^{-1}$ 时取到(7.4.36)式中 Δ^4 项的贡献，则重复上述计算可得:

$$\frac{c_s(T)}{c_N(T_c)} = \frac{T}{T_c} + \frac{4}{21\zeta(3)} \frac{T}{T_c} + \left(\frac{T}{T_c} - 1\right) \frac{114\zeta(5)}{31(7\zeta(3))^3} \tag{7.4.41}$$

或写为

$$\frac{c_s(T)}{c_N(T_c)} = 2.43 + 3.77\left(\frac{T}{T_c} - 1\right) \tag{7.4.42}$$

五、热力学临界磁场

由

$$\frac{H_c^2}{8\pi} = F_N - F_s \tag{7.4.43}$$

可求得热力学临界磁场. 由(7.4.28)式, 在 $T \ll T_c$ 时略去指数项, 且近似取 $\Delta \sim \Delta(0)$ 即得:

$$H_c(T) = H_c(0)\left[1 - \frac{\gamma^2}{3}\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right] = H_c(0)\left[1 - 1.06\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right] \tag{7.4.44}$$

其中

$$H_c(0)=\sqrt{\frac{2mp_0}{\pi}}\ \Delta(0)=T_c\frac{\pi}{\gamma}\sqrt{\frac{2mp_0}{\pi}} \qquad (7.4.45)$$

而实验结果为

$$H_c(T)=H_c(0)\left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right] \qquad (7.4.46)$$

另一方面在$T\approx T_c$时，由(7.4.38)即得：

$$\begin{aligned}H_c(T)&=\sqrt{\frac{16\pi mp_0T_c^2}{7\zeta(3)}}\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\\&=H_c(0)\gamma\sqrt{\frac{8}{7\zeta(3)}}\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\\&\approx 1.73H_c(0)\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\end{aligned} \qquad (7.4.47)$$

§7.5 弱恒定磁场中的超导体

现在研究超导体在相当弱的恒定磁场中的性质. 所谓弱磁场是指磁场强度的大小远小于临界磁场(H_c). 本节将从微观理论导出反映 Meissner 效应的 London 方程.

为具体起见，假设具有平面表面的超导体充满$z<0$的半空间，恒定磁场与超导体表面平行。大家知道，在超导体中的电流是由外磁场引起的。当外场弱时，可取电流密度对外磁场矢势A的线性近似，即$\boldsymbol{j}\propto\boldsymbol{A}$. 在坐标空间中可写下一般的非定域关系为：

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x})=-\int K(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\mathrm{d}\boldsymbol{x}' \qquad (7.5.1)$$

取傅里叶变换

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{q})=\int\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}_{\mathrm{i}}^{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}\boldsymbol{x} \qquad (7.5.2)$$

以(7.5.1)代入即得：

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{q})=-K(\boldsymbol{q})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{q}) \qquad (7.5.3)$$

其中

$$A(q)=\int A(x')e^{iq\cdot x'}dx'$$

$$(7.5.3')$$

$$K(q)=\int K(x-x')e^{iq\cdot(x-x')}d(x-x')$$

下面就是要从 Gorkov 方程组出发，用格林函数理论得出(7.5.3)形式的公式并求出 $K(q)$.

一、弱恒定外磁场下的 Gorkov 方程组

由第二章§2.1可得到计算电流密度的公式是：

$$j(x)=2\left\{\frac{ie}{2m}(\nabla_{x'}-\nabla_x)\mathscr{G}(x,x')-\frac{e^2A}{m}\mathscr{G}(x,x')\right\}_{\substack{x'\to x\\ \tau'=\tau+0}} \tag{7.5.4}$$

这需要求得格林函数才能计算 j. 格林函数由 Gorkov 方程组(7.3.22)及(7.3.24)式确定.

在恒定外磁场下，格林函数只和 $\tau-\tau'$ 有关，于是对 $\tau-\tau'$ 进行傅里叶变换得到：

$$\left\{i\omega+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x}-ieA(x)\right)^2+\mu\right\}\mathscr{G}_\omega(x,x')+\Delta(x)\mathscr{F}_\omega^+(x,x')=\delta(x-x') \tag{7.5.5}$$

$$\left\{-i\omega+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x}+ieA(x)\right)^2+\mu\right\}\mathscr{F}_\omega^+(x,x')-\Delta^*(x)\mathscr{G}_\omega(x,x')=0 \tag{7.5.6}$$

这里已考虑了 $\Delta,\Delta^*,\mathscr{G},\mathscr{F}^+$ 等在自旋空间的性质(见§7-4)，所以不象(7.3.22)及(7.3.24)式那样保留自旋下标. 在能量、空间表象中写出的(7.5.5)及(7.5.6)式方程组得以方便地处理空间非均匀情况.

现在求(7.5.5)及(7.5.6)式的线性近似解．写

$$\begin{aligned} \mathscr{G} &= \mathscr{G}_0 + \mathscr{G}^{(1)} \\ \mathscr{F} &= \mathscr{F}_0 + \mathscr{F}^{(1)} \\ \mathscr{F}^+ &= \mathscr{F}_0^+ + \mathscr{F}^{+(1)} \end{aligned} \tag{7.5.7}$$

其中 $\mathscr{G}_0$，$\mathscr{F}_0$ 及 $\mathscr{F}_0^+$ 表示无外磁场时的格林函数，$\mathscr{G}^{(1)}$，$\mathscr{F}^{(1)}$ 及 $\mathscr{F}^{+(1)}$ 是由外场导致的线性修正项．以(7.5.7)代入(7.5.5)及(7.5.6)只保留 $\boldsymbol{A}$ 的一次项即得：

$$\left\{\mathrm{i}\omega+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right\}\mathscr{G}_\omega^{(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')+\Delta_0\mathscr{F}_\omega^{+(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$$

$$=-\Delta^{(1)}(\boldsymbol{x})\mathscr{F}_{0\omega}^{+}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')+\frac{\mathrm{i}e}{2m}(\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{7.5.8}$$

$$\left\{-\mathrm{i}\omega+\frac{\nabla^2}{2m}+\mu\right\}\mathscr{F}_\omega^{+(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')-\Delta_0^*\mathscr{G}_\omega^{(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$$

$$=\Delta^{*(1)}(\boldsymbol{x})\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')-\frac{\mathrm{i}e}{2m}(\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\mathscr{F}_{0\omega}^{+}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{7.5.9}$$

这就是在弱恒定外磁场下线性化了的 Gorkov 方程组．

二、关于规范不变性

为了下面求解(7.5.8)及(7.5.9)式的需要，现在先讲一下方程(7.5.5)及(7.5.6)式的一个性质，即这些方程是规范不变的．

在量子力学中讲到[5]，对电磁势 $\boldsymbol{A}, V$ 作下列变换

$$V'=V-\frac{\partial\varphi}{\partial t},\quad \boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\nabla\varphi \tag{7.5.10}$$

其中 φ 为时空坐标的任意函数；若 $\Psi(x)$ 在 $\boldsymbol{A}, V$ 下是 Dirac 方程的一个解，则

$$\Psi'(x)\equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}e\varphi(x)}\Psi(x) \tag{7.5.11}$$

就是在 A',V' 下 Dirac 方程的一个解. 这叫作 Dirac 方程的规范不变性.

易于验证,Gorkov 方程(7.5.5)及(7.5.6)式具有规范不变性. 即当矢量势作规范变换

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}+\frac{\partial\varphi}{\partial\boldsymbol{x}} \tag{7.5.12}$$

时,格林函数各自变为:

$$\begin{aligned}&\mathscr{G}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\to\mathscr{G}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}e[\varphi(\boldsymbol{x})-\varphi(\boldsymbol{x}')]}\\&\mathscr{F}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\to\mathscr{F}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}e[\varphi(\boldsymbol{x})+\varphi(\boldsymbol{x}')]}\\&\mathscr{F}^{+}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\to\mathscr{F}^{+}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e[\varphi(\boldsymbol{x})+\varphi(\boldsymbol{x}')]}\end{aligned} \tag{7.5.13}$$

时方程形式不变. 注意,此时能隙变换为:

$$\begin{aligned}&\Delta\to\Delta\mathrm{e}^{2\mathrm{i}e\varphi(\boldsymbol{x})}\\&\Delta^*\to\Delta^*\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}e\varphi(\boldsymbol{x})}\end{aligned} \tag{7.5.14}$$

既然(7.5.5)及(7.5.6)式是规范不变的, 那么(7.5.8)及(7.5.9)式也是规范不变的. 另外, 自(7.5.4)式可以看出, 使 $\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}+\frac{\partial\varphi}{\partial\boldsymbol{x}}$ 不能改变电流密度 $\boldsymbol{j}$ 的值. 由此可以得出结论: 规范不变性保证 $\boldsymbol{j}$ 的最后结果只能和矢量势的横分量有关. 让我们对此作出如下解释. 将矢量势写为纵分量与横分量之和:

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}_{\parallel}+\boldsymbol{A}_{\perp} \tag{7.5.15}$$

其中 $A_{\perp}$ 为横分量,它满足

$$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{q})=0 \tag{7.5.16}$$

而 $\boldsymbol{A}_{\parallel}$ 为纵分量,它满足

$$\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{A}_{\parallel}(\boldsymbol{q})=0 \tag{7.5.17}$$

或写为

$$\nabla\times\boldsymbol{A}_{\parallel}=0 \tag{7.5.18}$$

根据后一个式子可知,$\boldsymbol{A}_{\parallel}$ 可写为某标量函数 φ 的梯度. 因此,

在(7.5.15)式中，我们总可对矢量势作规范变换将 $\boldsymbol{A}_{\parallel}$ 消去，从而只剩下$\boldsymbol{A}_{\perp}$. 由于 Gorkov 方程具有规范不变性，这样做并不影响最终物理结果. 因此，在计算电流密度时最终只和矢量势的横分量有关.

另外，对于任意的矢量势，一般说来 $\Delta(\boldsymbol{x})$是 $\boldsymbol{A}$ 的未知函数. 然而由于，一方面基于线性近似，$\Delta^{*(1)}(\boldsymbol{x})$应和 $\boldsymbol{A}$ 的一次方有关，另一方面$\Delta^{*(1)}(\boldsymbol{x})$是标量，而因为能在一次方项下和 $\boldsymbol{A}$ 构成标量的可能性只有

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A} \quad \text{及} \quad \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{A}$$

两种，所以若我们假定 $\Delta^{*(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 的关系只是通过$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$而来，那么就可以得出结论：$\Delta^{*(1)}(\boldsymbol{x})$只能和 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}$ 有关.

下面计算时取 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 的规范 (London 规范)，这时则可能令$\Delta^{*(1)}(\boldsymbol{x})$恒等于零，从而使计算大大简化了.

三、$\mathscr{G}_{\omega}^{(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$的积分形式

下面在 London 规范下证明：

$$\mathscr{G}_{\omega}^{(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\frac{\mathrm{i}e}{m}\int\Big\{\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{y})\cdot\nabla_{y})\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}')$$
$$+\mathscr{F}_{0\omega}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x})(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{y})\cdot\nabla_{y})\mathscr{F}_{0\omega}^{+}(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{y})\Big\}\mathrm{d}\boldsymbol{y} \tag{7.5.19}$$

证明：

在 $\boldsymbol{A}=0$ 下将方程组(7.5.5)及(7.5.6)式写为：

$$\begin{pmatrix}\left\{\mathrm{i}\omega+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right\} & \Delta_0\\ -\Delta_0^* & \left\{-\mathrm{i}\omega+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right\}\end{pmatrix}$$
$$\times\begin{pmatrix}\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') & \mathscr{F}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\\ \mathscr{F}_{0\omega}^{+}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') & -\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{7.5.20}$$

此式又可写为

$$\begin{pmatrix} \mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') & \mathscr{F}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\ \mathscr{F}^{+}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') & -\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}) \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} \left\{\mathrm{i}\omega+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right\} & \Delta_0 \\ -\Delta_0^* & \left\{-\mathrm{i}\omega+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right\} \end{pmatrix}^{-1}$$

$$\times\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{7.5.20'}$$

仿此，对(7.5.8)及(7.5.9)式可写为:

$$\begin{pmatrix} \mathscr{G}_{\omega}^{(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') & \mathscr{F}_{\omega}^{(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') \\ \mathscr{F}_{\omega}^{+(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') & -\mathscr{G}_{\omega}^{(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} \left\{\mathrm{i}\omega+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right\} & \Delta_0 \\ -\Delta_0^* & \left\{-\mathrm{i}\omega+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right\} \end{pmatrix}^{-1}$$

$$\times\begin{pmatrix} L_{11}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') & L_{12}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') \\ L_{21}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') & L_{22}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') \end{pmatrix}$$

$$=\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}''\begin{pmatrix} \left\{\mathrm{i}\omega+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right\} & \Delta_0 \\ -\Delta_0^* & \left\{-\mathrm{i}\omega+\frac{\nabla_x^2}{2m}+\mu\right\} \end{pmatrix}^{-1}$$

$$\times\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')\begin{pmatrix} L_{11}(\boldsymbol{x}''\boldsymbol{x}') & L_{12}(\boldsymbol{x}''\boldsymbol{x}') \\ L_{21}(\boldsymbol{x}''\boldsymbol{x}') & L_{22}(\boldsymbol{x}''\boldsymbol{x}') \end{pmatrix}$$

$$=\int \mathrm{d}\boldsymbol{x}''\begin{pmatrix} \mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'') & \mathscr{F}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'') \\ \mathscr{F}^{+}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'') & -\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}''-\boldsymbol{x}) \end{pmatrix}$$

$$\times\begin{pmatrix} L_{11}(\boldsymbol{x}''\boldsymbol{x}') & L_{12}(\boldsymbol{x}''\boldsymbol{x}') \\ L_{21}(\boldsymbol{x}''\boldsymbol{x}') & L_{22}(\boldsymbol{x}''\boldsymbol{x}') \end{pmatrix} \tag{7.5.21}$$

其中最后一步利用了(7.5.20′)式．由(7.5.21)式得:

$$\mathscr{G}_{\omega}^{(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\int\{\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')L_{11}(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}')$$

$$+\mathscr{F}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')L_{21}(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}')\}\mathrm{d}\boldsymbol{x}'' \qquad (7.5.22)$$

其中 L_{11},L_{21} 可从其定义式(即(7.5.21)式中第一个等号)及方程(7.5.8)及(7.5.9)式求得. 选 London 规范($\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$)，注意到 $\Delta^{*(1)}(\boldsymbol{x})=0$，以 L_{11},L_{21} 代入(7.5.22)即得(7.5.19)式.

四、线性近似下计算电流密度的公式

转入能量-空间表象，在线性近似(7.5.7)下，(7.5.4)式化为

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x})=\frac{\mathrm{i}e}{m}T\sum_{\omega_n}(\nabla_{x'}-\nabla_{x})\Big|_{x'\to x}\mathscr{G}_{\omega}^{(1)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')-\frac{e^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})N}{m} \qquad (7.5.23)$$

其中 N 表示单位体积中的电子数，已计及两种自旋. 将(7.5.19)代入(7.5.23)式即得:

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x})=\frac{e^2}{m^2}T\sum_{\omega_n}(\nabla_{x}-\nabla_{x'})\int\Big\{\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{y})\cdot\nabla_{y})\mathscr{G}_{0\omega}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}')+\mathscr{F}_{0\omega}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x})(\boldsymbol{A}\ \boldsymbol{y})\cdot\nabla_{y})\mathscr{F}_{0\omega}^{+}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\Big\}_{x'\to x}\mathrm{d}\boldsymbol{y}-\frac{Ne^2}{m}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \qquad (7.5.24)$$

转入傅里叶表象

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\boldsymbol{j}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}\boldsymbol{k}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}\boldsymbol{k}$$

则有:

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{k})=-\frac{2e^2T}{(2\pi)^3m^2}\sum_{\omega_n}\int\boldsymbol{p}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k}))\Big\{\mathscr{G}_{\omega}(\boldsymbol{p}_+)\mathscr{G}_{\omega}(\boldsymbol{p}_-)+\mathscr{F}_{\omega}(\boldsymbol{p}_+)\mathscr{F}_{\omega}^{+}(\boldsymbol{p}_-)\Big\}\mathrm{d}\boldsymbol{p}-\frac{Ne^2}{m}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k}) \qquad (7.5.25)$$

其中

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{p}_+ &\equiv \boldsymbol{p}+\frac{\boldsymbol{k}}{2} \\
\boldsymbol{p}_- &\equiv \boldsymbol{p}-\frac{\boldsymbol{k}}{2}
\end{aligned}
\tag{7.5.26}
$$

注意,(7.5.25)式中的 $\mathscr{G}_0(\boldsymbol{p}_+)$,$\mathscr{F}_0(\boldsymbol{p}_+)$ 等都是在零场下格林函数.

五、证明 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{k})$ 可写为(7.5.3)的形式

现在我们证明 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{k})$ 可写为(7.5.3)的形式. 这首先要表明

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{k}) /\!/ \boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})$$

在进行(7.5.25)式第一项的积分时，注意被积函数中只有两个固定的矢量,即 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})$. 前已说明,在我们选择的规范中,矢量势 $\boldsymbol{A}$ 只有横分量,因此 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{A}=0$, 即 $\boldsymbol{k}$ 与 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})$ 互相垂直. 取 $\boldsymbol{k}$ 方向为极坐标轴,如图 7.5 所示,可选图中 $\boldsymbol{A}$ 方向为 x 坐标轴. 于

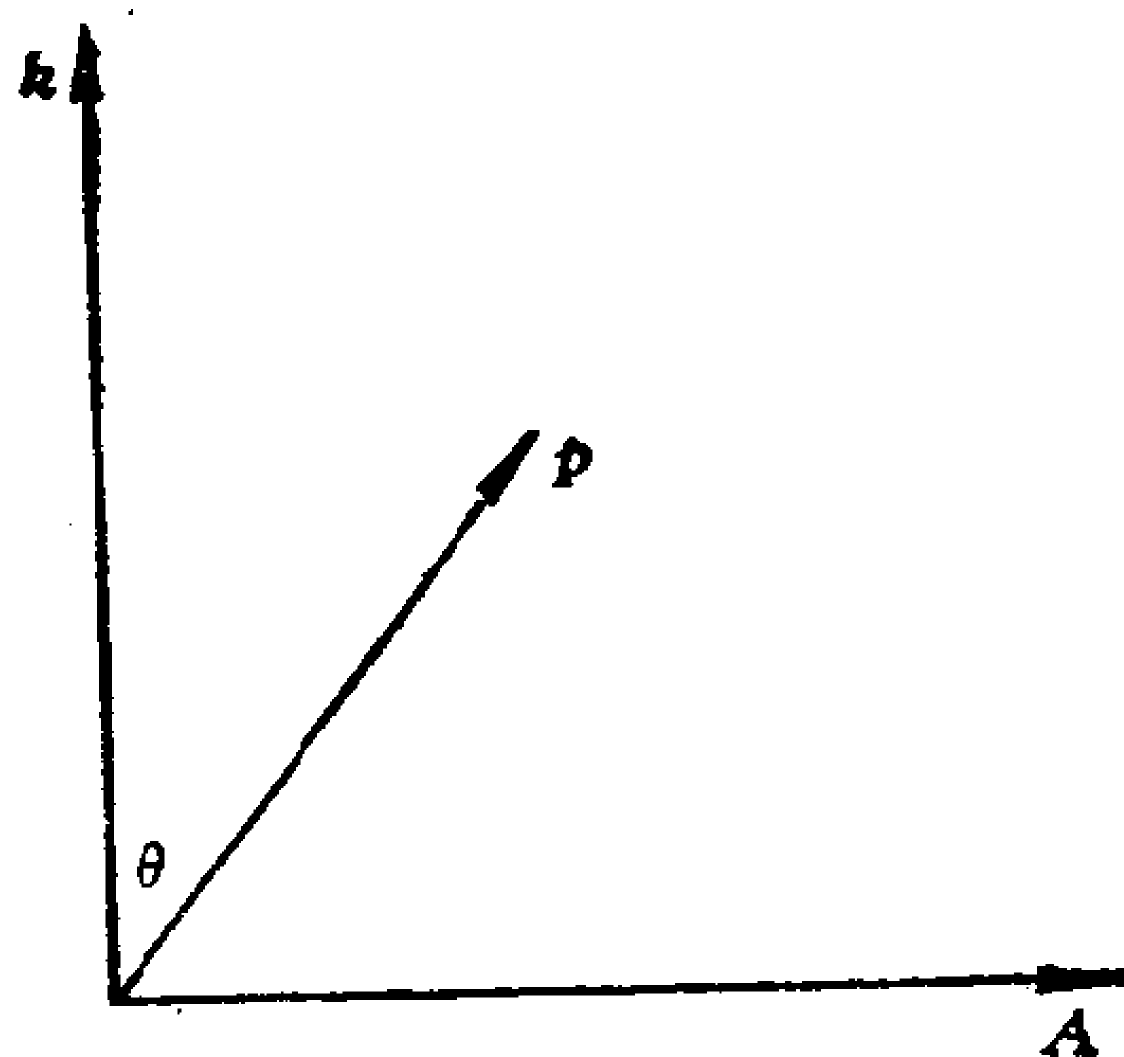


图 7.5　坐标系取法

是(7.5.25)式积分中被积函数的因子

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})=p_x A(\boldsymbol{k})=p\sin\theta\cos\varphi\, A(\boldsymbol{k}),$$

而被积函数中的

$$\boldsymbol{p}(\boldsymbol{p}\cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{k}))\mathrm{d}\boldsymbol{p}$$

只有第一分量(x 分量)不为零. 但第一分量即 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})$方向,这就证明了 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{k}) /\!/ \boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})$. 于是必可将(7.5.25)式写为如下形式

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{k}) = -\frac{Ne^2}{m}\bar{Q}(\boldsymbol{k})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k}) \tag{7.5.27}$$

若要求得 $\bar{Q}(\boldsymbol{k})$, 则要利用解的公式(7.3.43)及(7.3.44)式. 经计算后得

$$\bar{Q}(\boldsymbol{k}) = 1 + \frac{3T}{4}\sum_{\omega_n}\int_0^{\pi} \sin^3\theta \mathrm{d}\theta \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi \frac{(\mathrm{i}\omega+\xi_+)(\mathrm{i}\omega+\xi_-)+\Delta^2}{[\omega^2+\xi_+^2+\Delta^2][\omega^2+\xi_-^2+\Delta^2]} \tag{7.5.28}$$

其中

$$\xi_+ = \frac{\left(\boldsymbol{p}+\dfrac{\boldsymbol{k}}{2}\right)^2 - \boldsymbol{p}_0^2}{2m} \approx \xi + \frac{\boldsymbol{k}\cdot \boldsymbol{p}_0}{2m} = \xi + \frac{1}{2}(\boldsymbol{v}\cdot \boldsymbol{k}) \tag{7.5.29}$$

这里利用了 $\boldsymbol{k} \ll \boldsymbol{p}_0$ 的近似. 实际上, 大家知道超导体中的 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ 与 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ 在穿透深度(δ)数量级的距离上发生显著变化,而 $\delta \approx 10^{-5}$ 厘米,它远大于原子间距离 a. 由此看来, 在(7.5.25)式中起重要作用的

$$\boldsymbol{k} \approx \frac{1}{\delta} \ll \frac{1}{a} \approx \boldsymbol{p}_0 \quad ,$$

即

$$\boldsymbol{k} \ll \boldsymbol{p}_0$$

同理有:

$$\xi_- = \xi - \frac{1}{2}(\boldsymbol{v}\cdot \boldsymbol{k}) \tag{7.5.30}$$

另外,在得到(7.5.28)式时还利用了 $\frac{p_0^3}{3\pi^2} = N$ 的关系.

对(7.5.28)式中第二项求和及积分,若令 $\Delta=0$ 则为

$$\frac{3}{4}T\sum_{\omega_n}\int_0^\pi \sin^3\theta d\theta\int d\xi\frac{1}{(i\omega-\xi_+)(i\omega-\xi_-)}$$

这与正常金属情况相当．文献[6]研究了这个求和及积分的奇异性，指出应先对频率 $\omega_n=(2n+1)\pi T$ 求和然后积分得：

$$\frac{3}{4}T\int d\xi\sum_{\omega_n}\frac{1}{(i\omega-\xi_+)(i\omega-\xi_-)}\int_0^\pi \sin^3\theta d\theta$$

$$=\frac{3}{8}\int_0^\pi \sin^3\theta d\theta\int\frac{d\xi}{(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{k})}\left[\tanh\frac{\xi_-}{2T}-\tanh\frac{\xi_+}{2T}\right]$$

$$=-1 \tag{7.5.31}$$

利用(7.5.31)计算(7.5.28)式．所采用的技术是，在(7.5.28)式中加上再减去正常金属的表达式(7.5.31)式．这样作之后，两个被积表达式之差的积分和对频率求和迅速收敛，因而可以变换积分和求和顺序；另外(7.5.31)之结果－1与(7.5.28)右方第一项＋1相互抵消．结果得：

$$\bar{Q}(\boldsymbol{k})=\frac{3\pi T}{4}\sum_{\omega_n}\int_{-1}^{+1}\frac{(1-\mu^2)d\mu}{\sqrt{\omega^2+\Delta^2}}\frac{\Delta^2}{\omega^2+\Delta^2+\frac{1}{4}v^2|\boldsymbol{k}|^2\mu^2} \tag{7.5.32}$$

其中 $\mu=\cos\theta$

下面分两种情况继续讨论

六、London 情况

London 情况发生的条件是[7]

$$\xi_0\ll\delta$$

这里 ξ_0 表示超导相干长度，δ 为磁场穿透深度．而

$$\xi_0\approx\frac{v_F}{\Delta}\approx\frac{v_F}{T_c}$$

前已说明，在 (7.5.25) 式中起重要作用的 $k\approx\frac{1}{\delta}$. 所以

$$v_{\mathrm{F}}|\boldsymbol{k}|\approx\frac{v_{\mathrm{F}}}{\delta}\ll\frac{v_{\mathrm{F}}}{\xi_0}\approx T_{\mathrm{c}}$$

所以 London 情况相当于 $v_{\mathrm{F}}|\boldsymbol{k}|\ll T_{\mathrm{c}}$. 而用我们公式中的符号(见(7.5.29)式)即是

$$v|\boldsymbol{k}|\ll T_{\mathrm{c}} \tag{7.5.33}$$

这时，在(7.5.32)式中可对$v^2|\boldsymbol{k}|^2\mu^2/(\omega^2+\Delta^2)$展开，只取第一项即得:

$$\bar{Q}(\boldsymbol{k})=\frac{3\pi}{4}\Delta^2 T\sum_{\omega_n}\int_{-1}^{+1}\frac{(1-\mu^2)\,\mathrm{d}\mu}{(\omega^2+\Delta^2)^{3/2}}=\pi T\Delta^2\sum_{\omega}\frac{1}{(\omega^2+\Delta^2)^{3/2}} \tag{7.5.34}$$

由此可见，在 $\xi_0\ll\delta$ 条件下恰好表明 $\bar{Q}(\boldsymbol{k})$与 $\boldsymbol{k}$ 无关。

由(7.5.3′)的第二个式子可以看出，若

$$K(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\approx\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

则$K(\boldsymbol{q})$就与 $\boldsymbol{q}$ 无关，而由(7.5.1)式看出，此时

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x})\propto\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$

即为London的定域关系。由此可见，上面得到 $\bar{Q}(\boldsymbol{k})$与 $\boldsymbol{k}$ 无关的结果表明: $v|\boldsymbol{k}|\ll T_{\mathrm{c}}$的条件下，由(7.5.27) 式得到的电流密度与磁矢势之间的关系必为定域关系，这就是说，在点$\boldsymbol{x}$的电流密度值只由同一点的场值$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$决定，这与London 首先建议的方程

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x})=-\frac{e^2N_{\mathrm{s}}}{m}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{7.5.35}$$

相一致，其中 N_{s} 代表超导电子数密度。将(7.5.35)式两边取傅里叶变换即得:

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{q})=-\frac{e^2N_{\mathrm{s}}}{m}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{q})$$

将此式与(7.5.27)式对比可得:

$$\bar{Q}(\boldsymbol{k})=\frac{N_s}{N}=\pi T\Delta^2\sum_{\omega}\frac{1}{(\omega^2+\Delta^2)^{3/2}} \qquad (7.5.36)$$

其中最后一个等号使用了 London 情况下的 $\bar{Q}(\boldsymbol{k})$((7.5.34)式).

不妨利用(7.5.36)式计算一下超导电子数密度以作为对上述理论结果之检查. 首先计算 $T=0$K情况. 对 (7.5.36) 右方的频率求和按

$$T\sum_{\omega_n}\longrightarrow\frac{1}{2\pi}\int d\omega \qquad (7.5.37)$$

即可过渡到 $T=0$K 情形. 这时不难算出

$$\frac{N_s}{N}=\pi\Delta^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\frac{1}{(\omega^2+\Delta^2)^{3/2}}=1$$

这表明 $N_s=N$. 这就是说, 在 $T=0$K 时超导电子数等于电子总数.

我们还可计算一下靠近超导转变温度时的N_s,此时 $\Delta(T)\ll T_c$,于是(7.5.36)中对频率求和可近似计算如下:

$$\frac{N_s(T)}{N}\approx\frac{2\Delta^2}{\pi^2T^2}\sum_{n>0}\frac{1}{(2n+1)^3}$$

利用 Rieman ζ 函数 (见(7.4.14)式) 以及 T_c 附近的能隙公式(7.4.18)式即得:

$$\frac{N_s(T)}{N}\approx 2\left(1-\frac{T}{T_c}\right) \qquad (7.5.38)$$

当 $T=T_c$ 时$N_s=0$. 这当然是合理的。

七、Pippard 情况

重复上面的讨论,不难预料这里就应讨论

$$v|\boldsymbol{k}|\gg T_c$$

的情况. 我们略去冗长的计算只给出结果:

$$\bar{Q}(\boldsymbol{k})=\frac{3\pi^2}{4v|\boldsymbol{k}|}\Delta\tanh\frac{\Delta}{2T} \qquad (7.5.39)$$

我们看到,这时 $\bar{Q}(\boldsymbol{k})$与 $\boldsymbol{k}$ 有关,它是非局域的 Pippard 情况. 这时,给定空间点的电流密度 $\mathbf{j}(\boldsymbol{x})$,由在这个点附近线度为$\xi_0$(相干长度)的邻域内各点的矢量势确定.[8]

§ 7.6 G-L 方程的微观推导

一、G-L 方程概述

Ginzburg-Landau 方程原是唯象理论[9],它是在 1937年Landau 的二级相变普遍理论的基础上提出的[10]. Landau 认为存在一个序参量 ψ 以描写二级相变,在$T\geqslant T_c$(相变点)时 ψ 为零,而当T_c-T增加时ψ的大小增加;换句话说,$|\psi|=0$代表一相,它是丧失了某种秩序的相,而另一相则$|\psi|\neq 0$,且在 T_c 之下随着温度的降低有序度增加. 按照这一基本图象,在靠近 T_c 时,$|\psi|$为小量,自然可以寻求自由能按ψ的级数展开. Landau 假设可把单位体积的自由能写成如下形式:

$$F=F_n+\alpha(T)|\psi|^2+\frac{1}{2}\beta(T)|\psi|^4+\cdots \tag{7.6.1}$$

由此式易于看出自由能极小的条件是:

$$2|\psi|(\alpha+\beta|\psi|^2)=0 \tag{7.6.2}$$

由此可见

$$|\psi|=0 \tag{7.6.3}$$

是一个解,它对应于无序相,在超导问题中即是正常相。

另一解

$$|\psi|^2=-\frac{\alpha}{\beta}, \qquad \alpha<0,\beta>0 \tag{7.6.4}$$

即对应于有序相. Landau 还假设:

$$\alpha(T)=(T-T_c)\left(\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}T}\right)_{T_c} \tag{7.6.5}$$

$$\beta\approx\beta(T_c) \tag{7.6.6}$$

(7.6.4)—(7.6.6)式保证了在相变点 ($T=T_c$), $|\psi|=0$, 而这时相应的自由能为

$$F=F_{\rm n}-\frac{\alpha^2}{2\beta} \tag{7.6.7}$$

用到超导体情况时，上式左方即为F_s，所以有：

$$F_{\rm n}-F_s=\frac{\alpha^2}{2\beta} \tag{7.6.8}$$

而若再注意到超导物理中熟知的公式 $F_{\rm n}-F_s=\dfrac{H_c^2}{8\pi}$ 则可得：

$$H_c^2=\frac{4\pi\alpha^2}{\beta} \tag{7.6.9}$$

如果$|\psi|$是随空间坐标变化的，这时 Landau 假设自由能密度的形式为

$$F(\boldsymbol{x})=F_{\rm n}+\alpha(T)|\psi|^2+\frac{1}{2}\beta(T)|\psi|^4+\gamma|\nabla\psi|^2+\cdots \tag{7.6.10}$$

而总自由能 f 为

$$f=\int_\Omega F\mathrm{d}\boldsymbol{x} \tag{7.6.11}$$

1950 年 Ginzburg-Landau[9]在 BCS 理论尚未问世之前所提出的唯象理论之独到之处就在于：建议了一个赝波函数 $\psi(\boldsymbol{x})$ 作为复数有序参量而认为：

$$|\psi(\boldsymbol{x})|^2=n_s \tag{7.6.12}$$

其中 n_s 为超导态中超导电子数密度，它自然随空间坐标而变化．这样一来，$\psi(\boldsymbol{x})$具有一种超导电子(设其质量为m^*，电荷为e^*) 有效波函数的意义，而可写：

$$\psi(\boldsymbol{x})=\sqrt{n_s}\,\mathrm{e}^{i\varphi} \tag{7.6.13}$$

其中 $\varphi(\boldsymbol{x})$称为序参量的位相：Ginzburg-Landau 假设：

$$F_s=F_n+\alpha|\psi|^2+\frac{1}{2}\beta|\psi|^4+\frac{1}{2m^*}\left|\left(-i\hbar\nabla-\frac{e^*A}{c}\right)\psi\right|^2+\frac{H^2}{8\pi} \tag{7.6.14}$$

其中 H 为磁场, A 为矢量势.

使用变分法,对 ψ, H 变分使吉布斯自由能为极小则得出 Ginzburg-Landau(G-L)方程[11]:

$$\frac{1}{2m^*}\left(-i\hbar\nabla-\frac{e^*A}{c}\right)^2\psi+\alpha\psi+\beta|\psi|^2\psi=0 \tag{7.6.15}$$

$$\frac{c}{4\pi}\text{Curl}\,H=j=\frac{e^*\hbar}{2im^*}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)-\frac{(e^*)^2}{m^*c}|\psi|^2A \tag{7.6.16}$$

Gorkov 于 1959年[12]从超导微观理论导出了Ginzburg-Landau 方程,在这推导中表明

$$\psi(x)\propto\Delta(x) \tag{7.6.17}$$

$$\Delta(x)=|\lambda|\langle\hat{\psi}_\uparrow(x)\hat{\psi}_\downarrow(x)\rangle \tag{7.6.18}$$

$$e^*=2e \tag{7.6.19}$$

Gorkov 这个微观理论所用的近似是 (1) 温度充分靠近超导转变温度。(2)认为能隙函数 $\Delta(x)$ 足够小, 用它作小参量展开. (3)由于在超导转变温度附近穿透深度(δ)远大于相干长度ξ_0, 所以,所有在磁场中的量(包括场本身)在远大于 ξ_0 的距离上才有显著变化, 这样可认为它们是空间缓变函数. 下面我们就分步骤进行推导.

二、格林函数 $\mathscr{G}_\omega(x,x')$的积分形式

所使用的格林函数方程组仍为 (7.5.5) 及(7.5.6)式. 在(7.5.5)式中令$\Delta=0$,即得正常金属在$A(x)$下电子格林函数$\mathscr{G}_\omega^{(0)}$ 所满足的方程:

$$\left\{i\omega+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x}-ieA(x)\right)^2+\mu\right\}\mathscr{G}_\omega^{(0)}(x,x')=\delta(x-x') \tag{7.6.20}$$

此式可形式地写为

$$\Lambda \mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{7.6.21}$$

其中

$$\Lambda \equiv \mathrm{i}\omega + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} - \mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2 + \mu \tag{7.6.22}$$

(7.6.21)式又可形式地写为

$$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \frac{\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}{\Lambda} \tag{7.6.23}$$

另一方面，使用符号(7.6.22)可将(7.5.5)写为

$$\begin{aligned}\mathscr{G}_{\omega}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') &= \frac{\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}{\Lambda} - \frac{\Delta(\boldsymbol{x})\mathscr{F}_{\omega}^{+}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}{\Lambda} \\ &= \mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') - \int \frac{\Delta(\boldsymbol{l})\mathscr{F}_{\omega}^{+}(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x}')\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{l})}{\Lambda}\mathrm{d}\boldsymbol{l} \\ &= \mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') - \int \mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{l})\Delta(\boldsymbol{l})\mathscr{F}_{\omega}^{+}(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x}')\mathrm{d}\boldsymbol{l}\end{aligned} \tag{7.6.24}$$

其中最后一个等号利用了(7.6.23)式．(7.6.24) 式称为$\mathscr{G}_{\omega}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$的积分形式．

我们顺便指出，$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}$ 所满足的微分方程还可有另一形式：

$$\left\{\mathrm{i}\omega + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}'} + \mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\right)^2 + \mu\right\}\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{7.6.25}$$

这可由求$\frac{\partial}{\partial \tau'}\mathscr{G}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$及利用 $\hat{\psi}_{K}^{+}(\boldsymbol{x}')$的运动方程得到．

三、反常格林函数 $\mathscr{F}_{\omega}^{+}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$的积分形式

由(7.5.6)式可写

$$\mathscr{F}_{\omega}^{+}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \frac{\Delta^{*}(\boldsymbol{x})\mathscr{G}_{\omega}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}{\Lambda''} \tag{7.6.26}$$

其中

$$\Lambda''\equiv\left\{-\mathrm{i}\omega+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}+\mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2+\mu\right\} \tag{7.6.27}$$

(7.6.26)式又可写为:

$$\begin{aligned}\mathscr{F}_\omega^+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')&=\int\frac{\Delta^*(\boldsymbol{l})\mathscr{G}_\omega(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x}')\delta(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{x})}{\Lambda''}\mathrm{d}\boldsymbol{l}\\&=\int\Delta^*(\boldsymbol{l})\mathscr{G}_\omega(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x}')\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{l}\end{aligned} \tag{7.6.28}$$

其中最后一步利用了(7.6.25)式.

四、$\Delta^*(x)$的展开式

能隙$\Delta^*(\boldsymbol{x})$由下式给出

$$\Delta^*(\boldsymbol{x})=|\lambda|T\sum_\omega\mathscr{F}_\omega^+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) \tag{7.6.29}$$

所以若能求出$\mathscr{F}_\omega^+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})$按$\Delta$的展开式，代入 (7.6.29) 式即得$\Delta^*(\boldsymbol{x})$的展开式.为此我们先以(7.6.28)式代入(7.6.24)式得:

$$\begin{aligned}\mathscr{G}_\omega(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')&=\mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\\&-\int\mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{l})\Delta(\boldsymbol{l})\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{m},\boldsymbol{l})\Delta^*(\boldsymbol{m})\mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{m},\boldsymbol{x}')\mathrm{d}\boldsymbol{m}\mathrm{d}\boldsymbol{l}\end{aligned} \tag{7.6.30}$$

在上式右方第二项中已近似取$\mathscr{G}_\omega\approx\mathscr{G}_\omega^{(0)}$. 以(7.6.30)式代入(7.6.28)式并仍作此近似即得如下展开式:

$$\begin{aligned}\mathscr{F}_\omega^+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=&\int\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x})\Delta^*(\boldsymbol{l})\mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x}')\mathrm{d}\boldsymbol{l}\\&-\int\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x})\Delta^*(\boldsymbol{l})\mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{l},\mathbf{s})\Delta(\mathbf{s})\\&\times\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{m},\mathbf{s})\Delta^*(\boldsymbol{m})\mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{m},\boldsymbol{x}')\mathrm{d}\boldsymbol{l}\mathrm{d}\mathbf{s}\mathrm{d}\boldsymbol{m}\end{aligned} \tag{7.6.31}$$

此即在T_c附近(此时Δ为小量)$\mathscr{F}_\omega^+$按Δ展开式的前两项。以(7.

6.31)式代入(7.6.29)式即得 $\Delta^*(x)$ 的展开式:

$$\Delta^*(\boldsymbol{x})=|\lambda|T\sum_{\omega}\int\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x})\Delta^*(\boldsymbol{l})\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

$$-|\lambda|T\sum_{\omega}\iiint\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{l},\boldsymbol{m})\Delta(\boldsymbol{m})\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{s},\boldsymbol{x})\Delta^*(\boldsymbol{s})\cdot$$

$$\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{s},\boldsymbol{m})\Delta^*(\boldsymbol{l})\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{l},\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{l}\mathrm{d}\boldsymbol{m}\mathrm{d}\boldsymbol{s} \tag{7.6.32}$$

在得到上式右方第二项时已令 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}'$，且 $\boldsymbol{s},\boldsymbol{m}$ 符号互换了. 这是按 Δ 展开到三级的展开式. 在进一步计算之前必须先求 $\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}$.

五、$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}$ 的表达式

由(7.6.32)式可见，只有知道在有磁场下正常金属的格林函数才能进行计算(7.6.32)式右方的积分. 为此，我们先求无磁场时正常金属的格林函数 $\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$. 在(7.3.43)式中令 $\Delta=0$ 则得在动量-能量表象中的正常金属格林函数(无磁场):

$$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}=\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n-\xi} \tag{7.6.33}$$

对(7.6.33)式施以傅里叶变换转到能量-空间表象则有:

$$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\mathscr{G}^{(0)}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{\omega})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\mathrm{d}\boldsymbol{p}$$

$$=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{1}{\mathrm{i}\omega-\xi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}pR\cos\theta}p^2\mathrm{d}p\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

其中 $R\equiv|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|$, θ 为 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'$ 两矢量之间的夹角，积分用球极坐标计算，以矢量 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'$ 为极轴. 在对 θ,φ 进行积分后，再利用(7.2.53)与(7.2.54)进行换元即得:

$$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{\mathrm{i}R}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}R\left(\frac{\xi}{v_0}+p_0\right)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}R\left(\frac{\xi}{v_0}+p_0\right)}}{\mathrm{i}\omega-\xi}m\mathrm{d}\xi$$

利用复变函数理论中的约当定理将上式积分化为回路积分并应用

留数定理即得:

$$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(R)=\begin{cases}-\dfrac{m}{2\pi R}e^{\mathrm{i}p_0R-\frac{|\omega|}{v_0}R}, & 当\ \omega>0\\ -\dfrac{m}{2\pi R}e^{-\mathrm{i}p_0R-\frac{|\omega|}{v_0}R}, & 当\ \omega<0\end{cases}\tag{7.6.34}$$

其中 $R\equiv|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|$. 这就是在能量-空间表达式中无磁场下正常金属的格林函数. 函数(7.6.34)式又可改写为:

$$\begin{aligned}\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(R)&=-\frac{m}{2\pi R}e^{\mathrm{i}p_0R\,\mathrm{sign}\,\omega-\frac{|\omega|}{v_0}R}\\&=-\frac{m}{2\pi R}e^{\mathrm{i}(\mathrm{sign}\,\omega)R/P_0^{-1}-\frac{|\omega|}{v_0}R}\end{aligned}\tag{7.6.35}$$

由此可见 $\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(R)$以很短的周期($p_0^{-1}\sim10^{-8}$ 厘米)随空间坐标振荡,而其衰减距离为

$$\frac{v_0}{|\omega|}\approx\frac{v_0}{T_c}\approx\xi_0\tag{7.6.35'}$$

(7.6.20)式中的磁场只是在穿透深度 δ 的距离上它才发生显著变化。与此相反,$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(R)$是以 $p_0^{-1}\approx10^{-8}$ 厘米的周期发生振荡,所以在其振荡的许多周期范围内可视$\boldsymbol{A}$ 为局域化的常量. 因此,Gorkov假设磁场的主要效应可用一个空间缓慢变化的包络函数 φ 来表达,即设:

$$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=e^{\mathrm{i}\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\tag{7.6.36}$$

其中 $\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$满足

$$\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})=0\tag{7.6.37}$$

这是因为,对于$\boldsymbol{x}\approx\boldsymbol{x}'$,$\boldsymbol{A}$ 的贡献可略的原故. 以(7.6.36)式代入(7.6.20)式注意到

1. $$\left\{\mathrm{i}\omega+\frac{1}{2m}\nabla^2+\mu\right\}\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

2. 在我们所关心的场强下,电子在磁场中绕圈的半径 $\frac{p_0}{eH}$ 比

穿透深度大得多，即

$$p_0 \gg eH\delta \approx eA,$$

因而可略去诸如 A 的平方项，$\nabla^2\varphi$, $\nabla\varphi$ 等项．

3．对于(7.6.35)式我们只关心 $R \gg p_0^{-1}$ 的距离且衰减不大的情况．由(7.6.35)式看出，这就是要求

$$\frac{1}{R} \ll p_0$$

$$\frac{|\omega|}{v_0} \lesssim \frac{1}{R}$$

这样就可得到下列近似式

$$(\nabla_x \varphi - e\boldsymbol{A}) \cdot \boldsymbol{n} = 0 \tag{7.6.38}$$

$$\boldsymbol{n} \equiv \frac{\boldsymbol{R}}{R}$$

在得到此式时还用了 $\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$。

六、$\Delta^*(\boldsymbol{x})$展开式的计算

有了 $\mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$后就可着手计算(7.6.32)式了．首先我们注意到，由于(7.6.35′)式，在(7.6.32)式的积分中，积分的主要贡献来自 ξ_0的范围内，在此之外，$\mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$迅速衰减．另一方面我们知道在超导态内，$|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})|$和$|\Delta(\boldsymbol{x})|$只是在数量级为穿透深度 ($\delta$) 的距离上才发生显著变化．而因为当温度靠近超导转变温度的温区时

$$\delta \gg \xi_0$$

所以在 (7.6.32) 式所涉及的积分中，在积分的主要贡献范围上，$|\Delta(\boldsymbol{x})|$, $|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})|$是缓变的，作为零级近似可近似地取为常数．即使作随空间坐标之展开也无需很多展开项．

另外，对于(7.6.38)式，基于同样考虑，若视$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$为常量，则由该式积分可得：

$$\varphi \approx (eA(x)\cdot(x-x')) \tag{7.6.39}$$

而由于在 T_c 附近

$$A \approx H\delta \approx \sqrt{1-\frac{T}{T_c}} \tag{7.6.40}$$

因此,(7.6.39)式表明,在超导转变温度附近 $\varphi(x,x')$ 是小量,从而对(7.6.36)式的指数因子可按小量 φ 展开.

现在我们先处理(7.6.32)式中的第一项,它可写为

$$|\lambda|\int K(l,x)\Delta^*(l)\mathrm{d}l \tag{7.6.41}$$

其中

$$\begin{aligned} K(l,x) &\equiv T\sum_{\omega_n}\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(l,x)\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(l,x) \\ &= K_0(l-x)\exp\left\{2ie(A(x)\cdot(l-x)\right\} \end{aligned} \tag{7.6.42}$$

$$\left(K_0(l-x)=T\sum_n\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(l-x)\,\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(l-x)\right)$$

上面最后一个等号是利用了(7.6.36)及(7.6.39)式的结果.

按前述办法作小量展开即得:

$$\begin{aligned} |\lambda|\int K(l,x)\Delta^*(l)\mathrm{d}l = |\lambda|\int K_0(l-x)\Big[1+2ie\boldsymbol{A}(x)\cdot\boldsymbol{R} \\ +\frac{1}{2}(2ie)^2(\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{R})^2\Big]\times\Big[\Delta^*(x)+\frac{\partial\Delta^*}{\partial x}\cdot(l-x) \\ +\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\Delta^*(x):(l-x)\ (l-x)\Big]\mathrm{d}l \end{aligned} \tag{7.6.43}$$

其中 $\boldsymbol{R}=l-x$. 而

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\Delta(x):(l-x)(l-x) \\ &= (x'-x)^2\frac{\partial^2\Delta}{\partial x^2}+(y'-y)^2\frac{\partial^2\Delta}{\partial y^2}+(z'-z)^2\frac{\partial^2\Delta}{\partial z^2} \end{aligned}$$

$$+2(x'-x)(y'-y)\frac{\partial^2\Delta}{\partial x\partial y}+2(y'-y)(z'-z)\frac{\partial^2\Delta}{\partial y\partial z}$$

$$+2(x'-x)(z'-z)\frac{\partial^2\Delta}{\partial x\partial z} \qquad (7.6.44)$$

为处理这个积分,需要求出 $K_0(\boldsymbol{R})$,可以证明:

$$K_0(\boldsymbol{R})=\frac{m^2T}{(2\pi R)^2}\frac{1}{\sinh\frac{2sTR}{v}} \qquad (7.6.45)$$

证明如下. 利用(7.6.34)及(7.6.36)式即有:

$$K(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}')=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}e(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'))}\ \frac{m^2T}{(2\pi R)^2}\sum_n\exp\left[-\frac{2|\omega_n|R}{v_0}\right]$$

所以

$$K_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\frac{m^2T}{(2\pi R)^2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{2|\pi(2n+1)T|R}{v_0}\right]$$

$$=2\frac{m^2T}{(2\pi R)^2}\ \exp\left\{-\frac{2\pi RT}{v}\right\}\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left\{-\frac{2\pi TR}{v_0}2n\right\}$$

$$=\frac{m^2T}{(2\pi R)^2}\frac{1}{\sinh\frac{2\pi TR}{v_0}}$$

此即(7.6.45)式.

现在计算(7.6.43)式中第一项,即下面的项:

$$|\lambda|\int K_0(\boldsymbol{R})\Delta^*(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{R}$$

注意 $\boldsymbol{x}$ 为定点,而 $\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}$ 及 $\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}$ 由下式表达:

$$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n-\xi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\ \mathrm{d}\boldsymbol{p}$$

$$\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{1}{-\mathrm{i}\omega_n-\xi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}'\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}'$$

(7.6.46)

所以(注意 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{l}-\boldsymbol{x}$)

$$|\lambda|\int K_0(\boldsymbol{R})\Delta^*(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{R}=|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})\int K_0(\boldsymbol{R})\mathrm{d}\boldsymbol{R}$$

$$=-|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})\frac{T}{(2\pi)^6}\sum_n\int\mathrm{d}\boldsymbol{p}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}'\frac{1}{(\mathrm{i}\omega_n-\xi)(\mathrm{i}\omega_n+\xi)}$$
$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\cdot(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{x})}\mathrm{d}\boldsymbol{R}$$

$$=-|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})\frac{T}{(2\pi)^3}\sum_n\int\mathrm{d}\boldsymbol{p}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}'\frac{1}{(\mathrm{i}\omega_n-\xi)(\mathrm{i}\omega_n+\xi)}$$
$$\times\delta(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')$$

$$=4\pi|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})\frac{T}{(2\pi)^3}\int p^2\mathrm{d}p\sum_n\frac{1}{\omega_n{}^2+\xi^2}$$

$$=|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})\frac{mp_0}{2\pi^2}T\int\mathrm{d}\xi\sum_n\frac{1}{\omega_n{}^2+\xi^2}$$

$$=|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})\frac{mp_0}{2\pi^2}\int_0^{\omega_D}\mathrm{d}\xi\frac{\tanh\left(\frac{\xi}{2T}\right)}{\xi}$$

$$=|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})\frac{mp_0}{2\pi^2}\ln\left(\frac{\omega_D}{T}\frac{2\gamma}{\pi}\right) \tag{7.6.47}$$

其中在计算对频率求和时，采用了处理(7.3.47)式的方法. 在计算对ξ积分时利用了处理(7.4.1) 式的结果.

易于看出在(7.6.43)式中下面的项为零，即

$$|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})2\mathrm{i}e\int K_0(\boldsymbol{R})(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{R})\mathrm{d}\boldsymbol{R}$$

$$=|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})2\mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\int K_0(\boldsymbol{R})\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{R}=0 \tag{7.6.48}$$

事实上，由(7.6.45)式已知$K_0(\boldsymbol{R})$只是$|\boldsymbol{R}|=\boldsymbol{R}$的函数，所以(7.6.48)式中涉及**x，y，z**($\boldsymbol{R}$的分量)奇次幂的积分为零.

同理有(7.6.43)式中的下列项为零：

$$|\lambda|\int K_0(\boldsymbol{R})\frac{\partial\Delta^*}{\partial\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{R}=|\lambda|\frac{\partial\Delta^*}{\partial\boldsymbol{x}}\cdot\int K_0(\boldsymbol{R})\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{R}=0 \tag{7.6.49}$$

我们转而看(7.6.43)式中的下列项：

$$|\lambda|\int K_0(\boldsymbol{R})\frac{1}{2}(2\mathrm{i}e)^2(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{R})^2\Delta^*(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{R}$$

$$=-|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})2e^2\mathbf{A}^2\int K_0(\boldsymbol{R})R^2\cos^2\theta\mathrm{d}\boldsymbol{R} \quad (7.6.50)$$

其中 θ 为$\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{R}$ 之间的夹角．对于空间积分 $\mathrm{d}\boldsymbol{R}$ 可选用球极坐标计算，选$\boldsymbol{A}$ 方向为极轴，θ,φ 为球极坐标角．在具体计算之前我们看一下在(7.6.43)式中可与(7.6.50)合并的项，它们是：

$$|\lambda|\int K_0(\boldsymbol{R})2\mathrm{i}e\,(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{R})\left(\frac{\partial\Delta^*}{2\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{R}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{R}$$

$$=|\lambda|2ie\boldsymbol{A}\cdot\frac{\partial\Delta^*}{\partial\boldsymbol{x}}\int K_0(\boldsymbol{R})R^2\cos^2\theta\mathrm{d}\boldsymbol{R} \quad (7.6.51)$$

还有

$$|\lambda|\frac{1}{2}\int K_0(\boldsymbol{R})\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\Delta^*(x):(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{x})\ (\boldsymbol{l}-\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{R}$$

$$=\frac{\partial^2\Delta^*}{\partial\boldsymbol{x}^2}\frac{1}{2}|\lambda|\int K_0(\boldsymbol{R})R^2\cos^2\theta\mathrm{d}\boldsymbol{R} \quad (7.6.52)$$

(7.6.50)，(7.6.51)及(7.6.52)式三项合并，并将积分算出得到的最后结果为

$$|\lambda|\frac{1}{6}\frac{7\zeta(3)v^2}{8(\pi T)^2}\frac{mp_0}{2\pi^2}\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}+2\mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2\Delta^*(\boldsymbol{x}) \quad (7.6.53)$$

在得到这一结果时利用了下列关系：

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0 \quad (7.6.54)$$

$$\zeta(s,a)=\frac{1}{\Gamma(s)}\int_0^\infty\frac{x^{s-1}\mathrm{e}^{-ax}}{1-\mathrm{e}^{-x}}\mathrm{d}x \quad (7.6.55)$$

$$s=\sigma+\mathrm{i}t,$$

$$\sigma\geqslant1+\delta,\delta>0$$

$$\arg x=0.$$

$$\zeta(s,a)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(a+n)^s} \quad (7.6.56)$$

$$(2^s-1)\zeta(s)=\zeta(s,\frac{1}{2}) \qquad (7.6.57)$$

$\zeta(s,a)$为广义 Zeta 函数.

下面计算(7.6.32)式中的第二项，这是Δ的三级项，对此我们完全略去Δ随空间坐标的变化而把$\Delta(\boldsymbol{m})$，$\Delta^*(\mathbf{s})$及$\Delta^*(\boldsymbol{l})$都只用其在$\boldsymbol{x}$点的值代替，这样得到涉及四个格林函数乘积的积分:

$$-|\lambda|\ |\Delta(\boldsymbol{x})|^2\Delta^*(\boldsymbol{x})\iiint T\sum_{\omega_n}\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{m})\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{s}-\boldsymbol{x})\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\mathbf{s}-\boldsymbol{m})\mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}\boldsymbol{m}\,\mathrm{d}\mathbf{s} \qquad (7.6.58)$$

其中$\mathscr{G}_{\omega}^{(0)}$均为无磁场时正常金属的格林函数. 可利用(7.6.33)式及傅里叶变换式代入(7.6.58)式进行$\mathrm{d}\boldsymbol{l}\,\mathrm{d}\boldsymbol{m}\,\mathrm{d}\mathbf{s}\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_1\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_2\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_3\,\mathrm{d}\boldsymbol{p}_4$之积分运算得到:

$$\begin{aligned}&-|\lambda|\ |\Delta(\boldsymbol{x})|^2\Delta^*(\boldsymbol{x})T\sum_{\omega_n}\frac{mp_0}{2\pi^2}\int\frac{\mathrm{d}\xi}{(\omega^2+\xi^2)^2}\\&=-|\lambda|\ |\Delta(\boldsymbol{x})|^2\Delta^*(\boldsymbol{x})\frac{mp_0}{2\pi^2}\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T)^2}\end{aligned} \qquad (7.6.59)$$

在这一等号之计算中利用了(7.4.14)式.

将(7.6.47),(7.6.53)及(7.6.59)式之结果代回原来的(7.6.32)式即得:

$$\begin{aligned}\Delta^*=&|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})\frac{mp_0}{2\pi^2}\ln\left(\frac{\omega_D}{T}\frac{2\gamma}{\pi}\right)+|\lambda|\frac{1}{6}\frac{7\zeta(3)v^2}{8(\pi T)^2}\\&\times\frac{mp_0}{2\pi^2}\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}+2\mathrm{i}e\mathbf{A}(\boldsymbol{x})\right)^2\Delta^*(\boldsymbol{x})-|\lambda|\frac{mp_0}{2\pi^2}\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T)^2}\\&|\Delta(\boldsymbol{x})|^2\Delta^*(\boldsymbol{x})\end{aligned} \qquad (7.6.60)$$

这就是在$T\approx T_c$附近$\Delta^*(\boldsymbol{x})$的展开式. 方程中$T\approx T_c$，所以可写:

$$\ln\frac{2\gamma\omega_D}{\pi T}=\ln\frac{2\gamma\omega_D}{\pi T_c}+\ln\frac{T_c}{T}$$

$$=\ln\frac{2\gamma\omega_D}{\pi T_c}-\ln\left(1+\frac{T_c-T}{T}\right)$$

$$\approx\ln\frac{2\gamma\omega_D}{\pi T_c}+\frac{T_c-T}{T}=\frac{2\pi^2}{|\lambda|mp_0}+\frac{T_c-T}{T} \qquad (7.6.61)$$

其中最后一步利用了 (7.4.4)式. 以(7.6.61)式代入(7.6.60)式得:

$$\Delta^*(\boldsymbol{x})=\Delta^*(\boldsymbol{x})+|\lambda|\Delta^*(\boldsymbol{x})\frac{mp_0}{2\pi^2}\frac{T_c-T}{T}+|\lambda|\frac{mp_0}{2\pi^2}\frac{1}{6}\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T_c)^2}v^2$$

$$\times\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}+2\mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2\Delta^*(\boldsymbol{x})-|\lambda|\frac{mp_0}{2\pi^2}\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T_c)^2}|\Delta(\boldsymbol{x})|^2$$

$$\cdot\Delta^*(\boldsymbol{x}).$$

注意,上式中 v^2实际上为 v_F^2,引入:

$$\eta=\frac{7\zeta(3)}{6(\pi T_c)^2}\varepsilon_F \qquad (7.6.62)$$

$\left(\text{其中 } \varepsilon_F=\frac{1}{2}mv_F^2.\right)$则可将方程写为

$$\left\{\frac{1}{4m}\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}+2\mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2+\frac{1}{\eta}\left[\frac{T^c-T}{T_c}-\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T_c)^2}|\Delta(\boldsymbol{x})|^2\right\}\Delta^*(\boldsymbol{x})=0 \qquad (7.6.63)$$

这是描写 T_c附近,于恒定磁场中超导体性质的一个方程. 若按下式定义 $\psi(\boldsymbol{x})$

$$\psi(\boldsymbol{x})=\sqrt{\frac{7\zeta(3)N}{8(\pi T_c)^2}}\Delta(\boldsymbol{x}) \qquad (7.6.64)$$

则可将(7.6.63)写为:

$$\left\{\frac{1}{4m}\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}-2\mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2+\frac{1}{\eta}\left[\frac{T_c-T}{T_c}-\frac{1}{N}|\psi|^2\right]\right\}\psi(\boldsymbol{x})=0 \qquad (7.6.65)$$

(7.6.65)式是取了(7.6.63)的复数共轭. N是总电子数密度. 这

正好是 Ginzburg-Landau 第一方程(7. 6. 15)的形式，两者对比立即看出

$$m^* = 2m \\ e^* = 2e \tag{7. 6. 66}$$

这表明 Ginzburg-Landau 方程中的有效质量及有效电荷恰为 Cooper 对的质量和电荷. 将(7. 6. 65)与(7. 6. 15)对比可得出

$$\alpha = -\frac{6\pi^2 T_c^2}{7\zeta(3)\varepsilon_F}\left(1-\frac{T}{T_c}\right) \tag{7. 6. 67}$$

$$\beta = \frac{6\pi^2 T_c^2}{7\zeta(3)\varepsilon_F N} \tag{7. 6. 68}$$

即从微观理论得出了 Ginzburg-Landau 方程的唯象系数.

七、电流密度方程

现在求(7. 6. 16)式. 求电流密度的公式仍为(7. 5. 4)式，现改写为:

$$\boldsymbol{j}(x) = \frac{ie}{m} T \sum_{\omega_n} (\nabla_{x'} - \nabla_x) \Big|_{x' \to x} \mathscr{G}_\omega(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') - \frac{2e^2}{m} \boldsymbol{A} T \sum_{\omega_n} \mathscr{G}_\omega(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) \tag{7. 6. 69}$$

将(7. 6. 30)式写为:

$$\mathscr{G}_\omega(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') + \delta\mathscr{G}_\omega(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \tag{7. 6. 70}$$

其中

$$\delta\mathscr{G}_\omega(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = -\int \mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{l}) \Delta(\boldsymbol{l}) \mathscr{G}_{-\omega}^{(0)}(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{l}) \Delta^*(\boldsymbol{m}) \mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{x}') \mathrm{d}\boldsymbol{m}\mathrm{d}\boldsymbol{l} \tag{7. 6. 71}$$

其中 $\mathscr{G}_\omega^{(0)}$代表正常金属在磁场 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$中的电子格林函数. 大家知道，在恒定磁场中正常金属电流为零，所以应有:

$$\frac{ie}{m} T \sum_{\omega_n} (\nabla_{x'} - \nabla_x) \Big|_{x' \to x} \mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') - \frac{2e^2}{m} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) T \sum_{\omega_n} \mathscr{G}_\omega^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = 0. \tag{7. 6. 72}$$

于是总的超导电流只能由下式给出

$$j(x)=\frac{\mathrm{ie}}{m}(\nabla_{x'}-\nabla_x)_{x'\to x}T\sum_{\omega_n}\delta\mathscr{G}_\omega(x,x')-\frac{2e^2}{m}A(x)T\sum_{\omega_n}\delta\mathscr{G}_\omega(x,x) \tag{7.6.73}$$

以(7.6.71)式代入 (7.6.73) 式进行计算，注意梯度运算对$\mathscr{G}^{(0)}_{-\omega}(m,l)$无作用，只应对$\mathscr{G}^{(0)}_\omega(x,l)$，$\mathscr{G}^{(0)}_\omega(m,x')$作梯度微商；还注意使用(7.6.36)及(7.6.39)式，这样就会发现(7.6.73)式中的第二项与(7.6.73)式中第一项梯度运算结果的一部分恰好抵消，最后剩下：

$$j(x)=-\frac{\mathrm{ie}}{m}T\sum_{\omega_n}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(x,l)+\mathrm{i}\varphi(m,x')}\left[\mathscr{G}^{(0)}_\omega(x-l)\nabla_{x'}\mathscr{G}^{(0)}_\omega(m-x')-\mathscr{G}^{(0)}_\omega(m-x')\nabla_x\mathscr{G}^{(0)}_\omega(x-l)\right]_{x'\to x}\mathscr{G}^{(0)}_{-\omega}(m,l)\Delta^*(m)\times\Delta(l)\mathrm{d}m\mathrm{d}l \tag{7.6.74}$$

仍按得到Ginzburg-Landau第一方程时的展开法，即对$\Delta^*(m)$，$\Delta(l)$在$\Delta^*(x)$ ($\Delta(x)$)附近展开，对指数项$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$等按$\varphi$展开，此次我们只在$x$附近展开到一次项，进行积分最后得：

$$j(x)=\left[\frac{\mathrm{ie}}{m}\left(\Delta\frac{\partial\Delta^*}{\partial x}-\Delta^*\frac{\partial\Delta}{\partial x}\right)-\frac{4e^2|\Delta|^2}{m}A(x)\right]C \tag{7.6.75}$$

其中

$$C=\frac{1}{3}T\sum_{\omega_n}\iint([(\nabla_x\mathscr{G}^{(0)}_\omega(x-l))\mathscr{G}^{(0)}_\omega(m-x)-\mathscr{G}^{(0)}_\omega(x-l)\cdot(\nabla_x\mathscr{G}^{(0)}_\omega(m-x))]\cdot m)\mathscr{G}^{(0)}_{-\omega}(m-l)\mathrm{d}m\mathrm{d}l \tag{7.6.76}$$

利用傅里叶变换：

$$\mathscr{G}^{(0)}_\omega(x)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot x}\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n-\xi} \tag{7.6.77}$$

经过冗长而直接了当的计算可得：

$$C=\frac{7\zeta(3)N}{16(\pi T_c)^2} \tag{7.6.78}$$

再利用(7.6.64)式即可将(7.6.75)式写为

$$\boldsymbol{j}(x)=-\frac{2ie}{4m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)-\frac{(2e)^2}{2m}\boldsymbol{A}(x)|\psi|^2 \tag{7.6.79}$$

这正是G-L 第二方程(7.6.16)式(注意，这里取的是 $\hbar=C=1$ 单位制).

文献[13]讨论了具有负关联能局域电子对的非简单金属的G-L 方程之推广.

§7.7 强耦合超导理论

前面讲的都是弱耦合理论，弱耦合条件是 $N(0)V\ll1$. Gorkov 理论与 BCS 原理论只是所用理论方法不同，没有物理实质区别. 弱耦合的 BCS 理论基本上解释了各种超导现象，而且对许多超导材料讲，理论与实验相当好地一致. 然而也有不少例外. 例

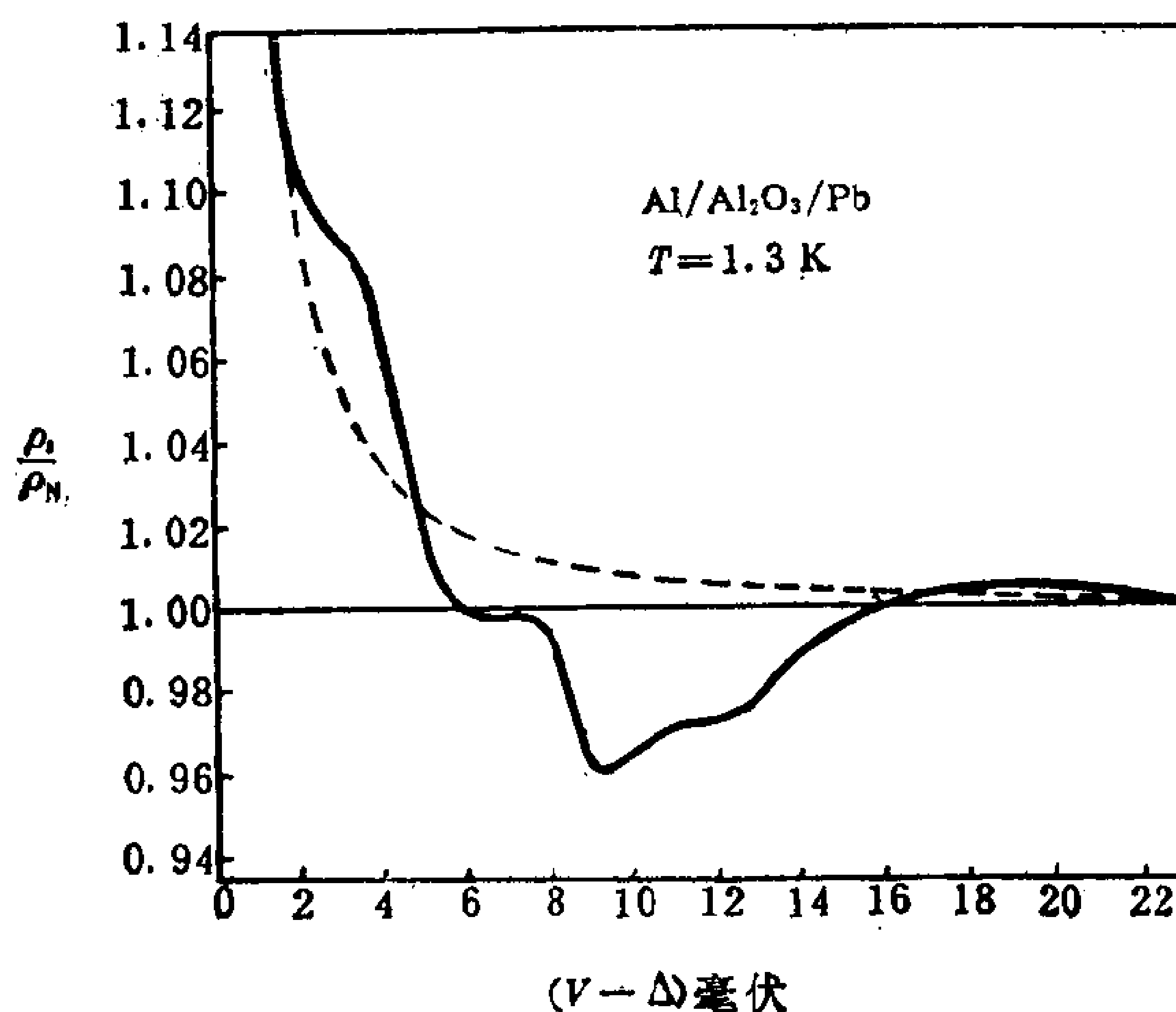


图 7.6

如 BCS 理论预言

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c}=3.52$$

(见(7.1.45)式),这对许多超导体的实验数据符合很好. 但是,对 Pb,实验值却为 4.3,对 Hg 为 4.6. 实验观察到的铅的超导凝结能比 BCS 预测值低 25%. 图 7.6 及 7-7还给出了铅和汞的隧道效应特性[14][15]. 图中虚线表示 BCS 理论结果. 可以看出,理论与

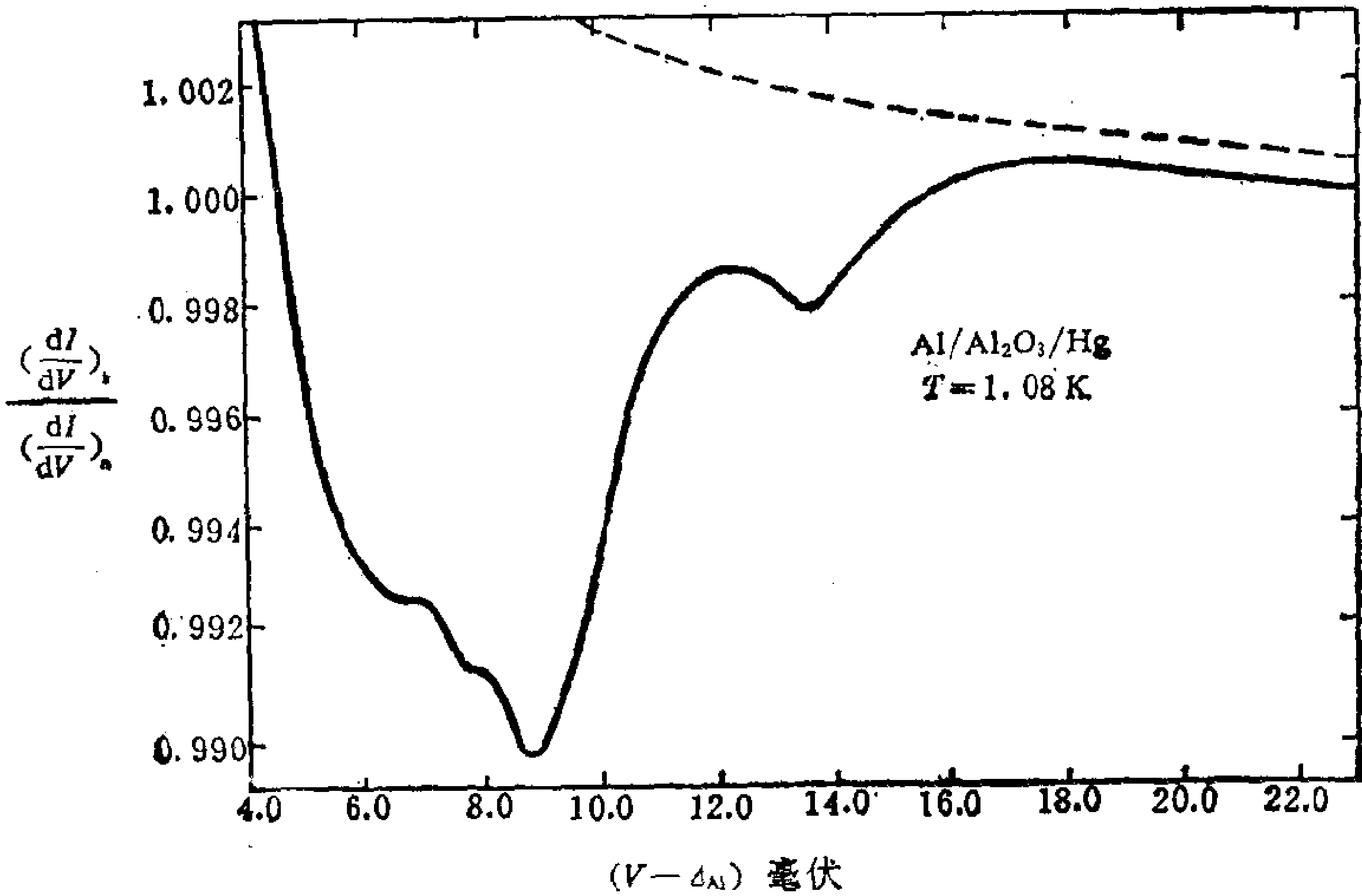


图 7.7

表 7.1

非晶金属	T_c(K)	$2\Delta(0)$(meV)	$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c}$	λ
Bi	6.1	2.42	4.60	2.2—2.46
Ga	8.4	3.32	4.60	1.94—2.25
$Sn_{0.9}Cu_{0.1}$	6.76	2.6	4.46	1.84
$pb_{0.9}Cu_{0.1}$	6.5	2.66	4.75	2.0
$Pb_{0.75}Bi_{0.25}$	6.9	2.96	4.98	2.76
$In_{0.8}Sb_{0.2}$	5.6	2.13	4.40	1.69
$Tl_{0.9}Te_{0.1}$	4.2	1.67	4.6	1.70

实验有相当的差异. 此外，一些非晶态非过渡族元素或合金的 $2\Delta(0)/k_BT_c$也显著偏离 BCS 理论值[16]，见表 7.1.

下面诸原因均可导致与 BCS 理论的偏离. 1. 准粒子描写变得不太合适. 比如，当衰减率与元激发能可比拟的时候尤其如此. 2. 准粒子间的两体瞬时作用可能失效，而应考虑由声子所诱导的相互作用的推迟性质. 3. 配对假说可能需要修改.

在强耦合条件下，对 1,2 两条肯定要予以考虑，这里涉及复杂的、强相互作用着的多体问题. 我们将在本节逐步解决它们，并最终建立起 Eliashberg 方程[17]，对它可求得近似解[18].

一、Nambu 表示[19]

Nambu 引入了二分量场算符:

$$\Psi_p=\begin{pmatrix}C_{p\uparrow}\\ C^+_{-p\downarrow}\end{pmatrix}\qquad \Psi^+_p=(C^+_{p\uparrow},C_{-p\downarrow}) \tag{7.7.1}$$

并引入矩阵格林函数 $\hat{G}$ 如下:

$$\hat{G}=-\begin{pmatrix}\langle T_\tau(C_{p\uparrow}(\tau)C^+_{p\uparrow}(0))\rangle & \langle T_\tau(C_{p\uparrow}(\tau)C_{-p\downarrow}(0))\rangle\\ \langle T_\tau(C^+_{-p\downarrow}(\tau)C^+_{p\uparrow}(0))\rangle & \langle T_\tau(C^+_{-p\downarrow}C_{-p\downarrow}(0))\rangle\end{pmatrix} \tag{7.7.2}$$

其中〈…〉代表巨正则系综平均. G_{11}矩阵元素就是前几节用过的正常电子(自旋向上)格林函数（这是在时间-动量表象中写的）; G_{12}及 G_{21}就是 Gorkov 理论中的反常格林函数; G_{22}可视为自旋向下的空穴格林函数. Nambu 形式的重要性在于，在这矩阵形式下，以前我们所熟悉的微扰理论 Feyman-Dyson 规则依然成立，唯一的变化是: 把一电子线与一两体位势(或声子作用线）耦合起来的每一顶角要含一个因子 $\hat{\tau}_3$:

$$\hat{\tau}_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{7.7.3}$$

计算时还要注意，矩阵次序要与图形对应．文献[20]对此有详细论述，读者可以参考，这里直接按此计算．

与(1.6.7)式对应，现在有 2×2 矩阵方程：

$$\hat{G}^{-1}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n)=\hat{G}_0^{-1}-\hat{\Sigma}=\mathrm{i}\omega_n\hat{1}-\varepsilon_p\hat{\tau}_3-\hat{\Sigma}(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n) \tag{7.7.4}$$

其中

$$\hat{1}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} \tag{7.7.5}$$

$$\hat{G}_0^{-1}=\mathrm{i}\omega_n\hat{1}-\varepsilon_p\hat{\tau}_3 \tag{7.7.6}$$

$\hat{G}_0$代表自由电子的矩阵格林函数，(7.7.6)与(7.6.33)相对应，ε_p 与 ξ 一样是自 Fermi 能计起能量．(7.7.6)式右方第二项的因子 $\hat{\tau}_3$之来由请读者参考文献[20]的(7-29)到(7-33)式．在 Nambu 表示中，自能的最一般形式可写为：

$$\hat{\Sigma}=(1-Z(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n))\mathrm{i}\omega_n\hat{1}+\phi(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n)\hat{\tau}_1+\phi'(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n)\hat{\tau}_2$$
$$+\chi(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n)\hat{\tau}_3 \tag{7.7.7}$$

其中

$$\hat{\tau}_1=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\qquad \tau_2=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \tag{7.7.8}$$

(7.7.7)式右方第一项是对(7.7.4)式右方第一项 $\mathrm{i}\omega_n\hat{1}$ 的重正化，称 Z 为重正化因子．(7.7.7)式右方第二、三两项是与对关联有关的非对角项．选 $\phi'=0$，则可证 ϕ 即与超导能隙参量相关[20]．(7.7.7)式右方最后一项代表 Hartree-Fock 势．选 $\phi'=0$，以(7.7.7)式代入(7.7.4)式可得：

$$\hat{G}^{-1}=Z(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n)\mathrm{i}\omega_n\hat{1}-\bar{\varepsilon}_p\hat{\tau}_3-\phi(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n)\hat{\tau}_1 \tag{7.7.9}$$

其中 $\bar{\varepsilon}_p\equiv\varepsilon_p+\chi$．这又可写为

$$\hat{G}(p)=-\frac{Z\mathrm{i}\omega_n\hat{1}+\bar{\varepsilon}_p\hat{\tau}_3+\phi(p)\hat{\tau}_1}{[Z(p)\omega_n]^2+E^2(p)} \tag{7.7.10}$$

其中 $p=(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n)$．

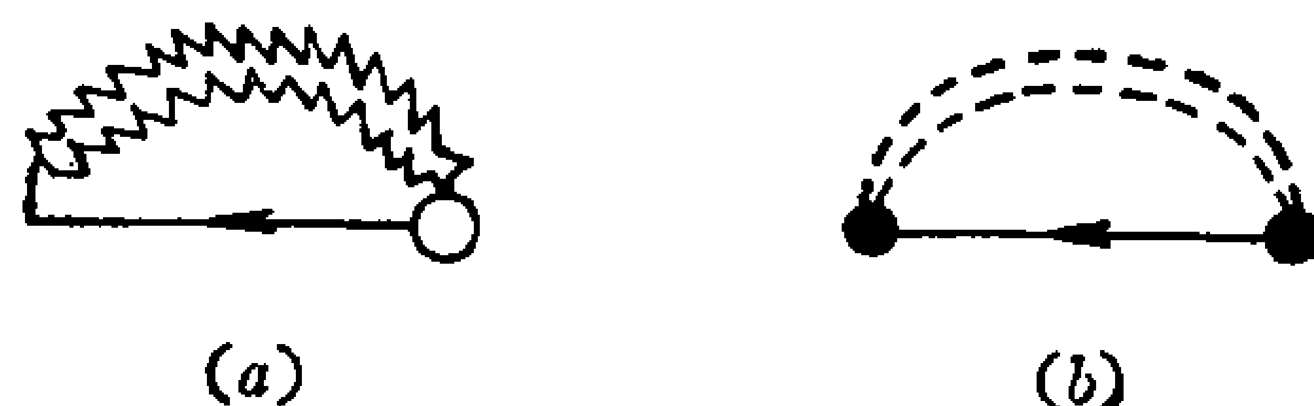
$$E^2(p)=\bar{\varepsilon}_p^2+\phi^2 \tag{7.7.11}$$

可以看出(7.3.43)及(7.3.44)式是G_{11}和G_{21}的特殊情形，那里$Z=1$，Δ(相当于这里的ϕ)取为实数．一般地说ϕ并不必须为实的．事实上，ϕ的虚部给出准粒子的衰减率．还应指出，现在Z，χ和ϕ都是四维动量$p(=(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n))$的函数而不只是三维动量$\boldsymbol{p}$的函数，这种推广正是为了讨论推迟效应．

今后将略去符号"^"不写．

二、自能

准确到$\left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{1}{2}}\approx\frac{1}{100}$(其中$m$为电子质量，$M$为离子质量)只须考虑下列自能图的贡献[21]：



(a)　　　(b)

图 7.8　自能图

图7.8(a)中的双波纹线代表屏蔽库仑作用V_{sc}，由§5.4可知

$$V_{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{V_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{q})}{\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)} \tag{7.7.12}$$

其中$V_{\mathrm{c}}(\boldsymbol{q})$为裸的库仑作用，$\varepsilon$为介电函数，它反映电荷的屏蔽作用．图7.8(a)中的空心小圆圈代表固有库仑顶角．在图7.8(b)中的双虚线代表饰声子(dressed phonon)格林函数．小实心圆点代表

$$\bar{g}=g\frac{\Lambda}{\varepsilon} \tag{7.7.13}$$

参见(5.4.13)式．与图7.8(a)(b)对应的公式为：

$$\Sigma_C(\boldsymbol{p},\mathrm{i}\omega_n)=-\frac{1}{\beta}\sum_{m,\boldsymbol{p}'}V_{sc}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}',\mathrm{i}\omega_n-\mathrm{i}\omega_m)\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';\mathrm{i}\omega_n,\mathrm{i}\omega_m)\cdot\tau_3G(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}\omega_m)\tau_3 \tag{7.7.14}$$

$$\Sigma_{ph}(\boldsymbol{p},\ \mathrm{i}\omega_n)=-\frac{1}{\beta}\sum_{m,\boldsymbol{p}',\lambda}\left|\frac{\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')g_\lambda(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')}{\epsilon(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')}\right|^2\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}',\mathrm{i}\omega_n-\mathrm{i}\omega_m)\tau_3G(\boldsymbol{p}',\mathrm{i}\omega_m)\tau_3 \tag{7.7.15}$$

其中 $\beta=\frac{1}{k_BT}$. 在(7.7.15)式中对电声顶角部分采用了静极限.

三、Σ_{ph}之计算

在(7.7.15)式中涉及对 $\mathrm{i}\omega_m$求和，为此需利用格林函数 $\mathscr{D}_\lambda$, G 的谱表示以显示出其随 $\mathrm{i}\omega_m$的关系. 声子格林函数的谱表示为:

$$\mathscr{D}_\lambda(q,\ \mathrm{i}\omega_\nu)=\int_0^\infty \mathrm{d}\Omega B_\lambda(q,\ \Omega)\frac{2\Omega}{(\mathrm{i}\omega_\nu)^2-\Omega^2} \tag{7.7.16}$$

G 的谱表示可写为:

$$G(\boldsymbol{p},\ \mathrm{i}\omega_m)=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{\pi}\frac{\mathrm{Im}G(\boldsymbol{p},\omega'+\mathrm{i}\delta)}{\mathrm{i}\omega_m-\omega'} \tag{7.7.17}$$

以(7.7.16)及(7.7.17)式代入(7.7.15)式得出(7.7.15)式中对频率求和部分为:

$$-\frac{1}{\beta}\sum_m G(\mathrm{i}\omega_m)\mathscr{D}(\mathrm{i}\omega_n-\mathrm{i}\omega_m)=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}\Omega B_\lambda(q,\Omega)\mathrm{Im}G(\omega'+\mathrm{i}\delta)\times\left(-\frac{1}{\beta}\right)\sum_m\frac{1}{\mathrm{i}\omega_m-\omega'}\frac{2\Omega}{(\mathrm{i}\omega_n-\mathrm{i}\omega_m)^2-\Omega^2} \tag{7.7.18}$$

在计算(7.7.18)式中对频率求和时我们利用 Poisson 求和技术，这项技术写出了如下的一般公式:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty}F(\mathrm{i}\omega_n)=-\frac{\beta}{2\pi\mathrm{i}}\int_c\frac{F(\omega)}{\mathrm{e}^{\beta\omega}+1}\mathrm{d}\omega,\qquad \omega_n=\frac{(2n+1)\pi}{\beta}. \tag{7.7.19}$$

(7.7.19)式右方为复变函数在复ω平面的回路积分，其回路如图7.9所示，是包围虚ω轴的回路，但它不包围任何$F(\omega)$的奇点. 注

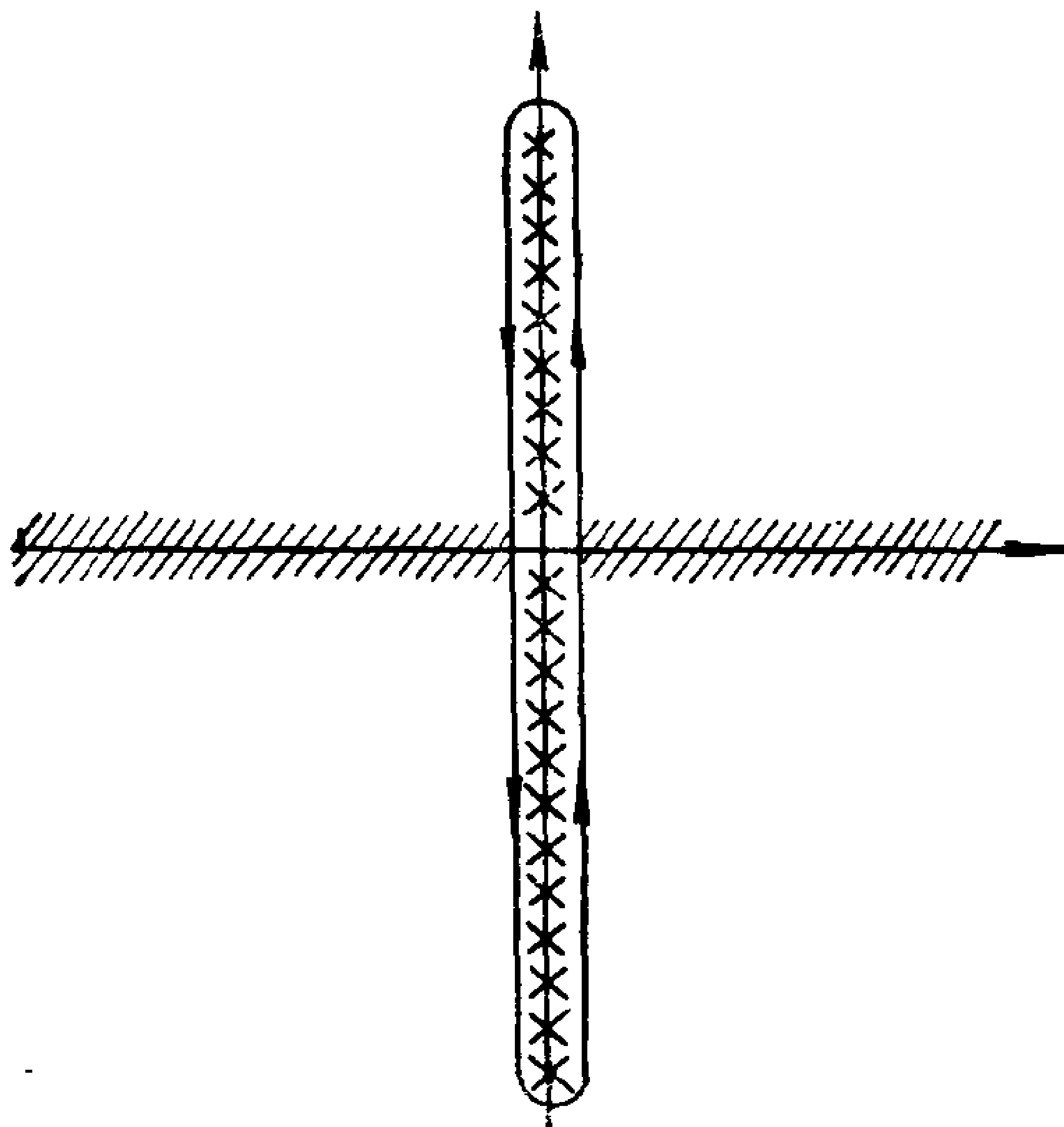


图 7.9 (7.7.19)右方积分回路

意到$e^{\beta\omega}+1=0$的极点即在$\omega=\mathrm{i}\omega_n$，利用留数定理不难证明(7.7.19)式. 顺便指出对于玻色子则上述公式改为

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} F(\mathrm{i}\nu_m)=\frac{\beta}{2\pi\mathrm{i}}\int_c \frac{F(\nu)}{e^{\beta\nu}-1}\mathrm{d}\nu, \qquad \nu_m=\frac{2m\pi}{\beta} \tag{7.7.19'}$$

然后使用下述技术，即：将ω（或ν）的回路扩展到无穷，而当回路向外移时去取$F(\omega)$奇点对回路积分的贡献；在多数情况下，其余的、沿无穷远的大圆上的积分贡献为零，因为F在这大圆上趋于零.

使用 Poisson 求和公式(7.7.19)式即可有：

$$-\frac{1}{\beta}\sum_m \frac{1}{\mathrm{i}\omega_m-\omega'}\frac{2\Omega}{(\mathrm{i}\omega_n-\mathrm{i}\omega_m)^2-\Omega^2}$$

$$=\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi\mathrm{i}}f(\omega)\frac{1}{\omega-\omega'}\ \frac{2\Omega}{(\mathrm{i}\omega_n-\omega)^2-\Omega^2} \tag{7.7.20}$$

其中

$$f(\omega)=\frac{1}{e^{\beta\omega}+1} \tag{7.7.21}$$

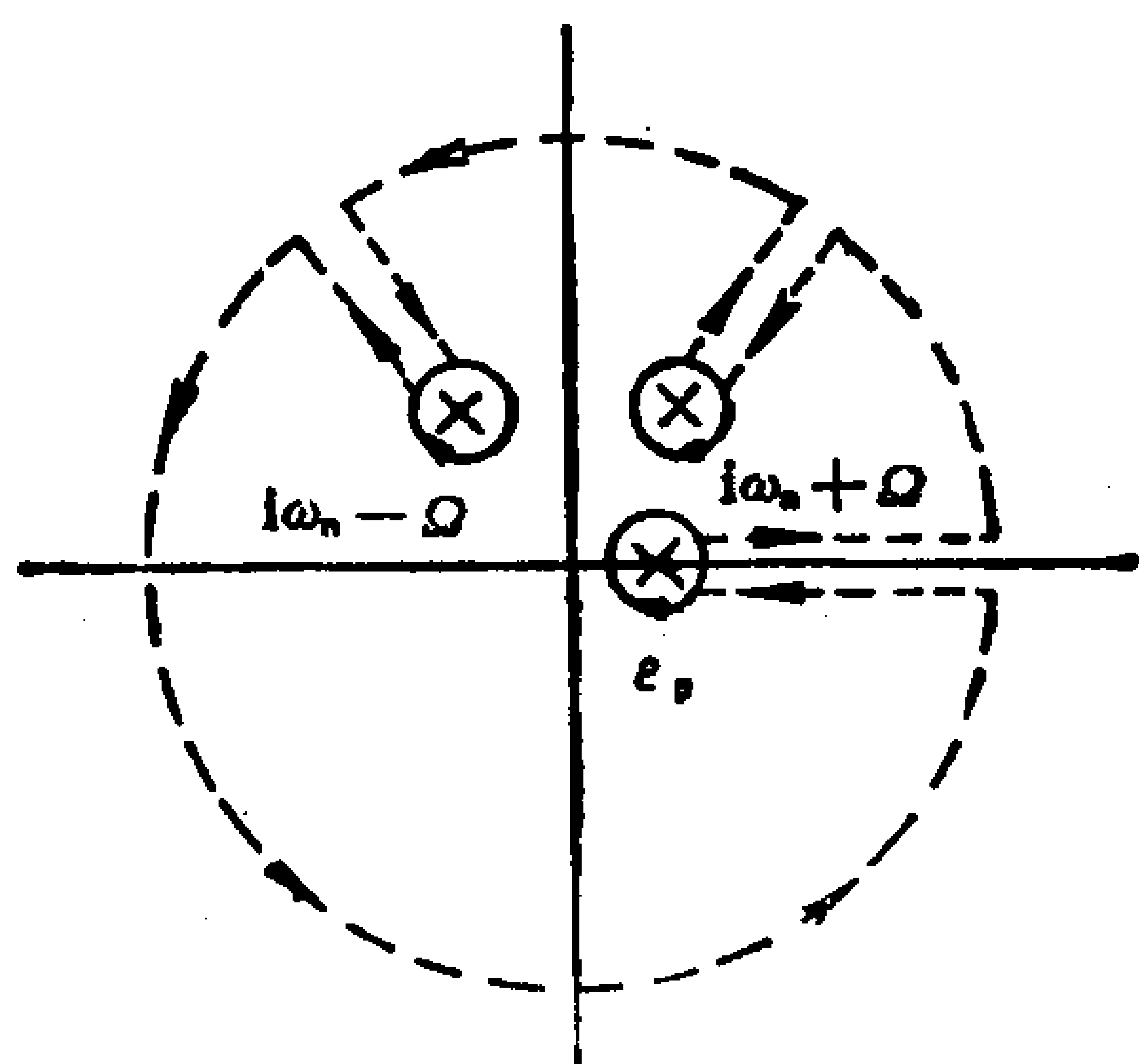


图 7.10　图 7.9 的回路变形

照前述技术，将图7.9的回路变形为图7.10．在图7.10中虚线回路部分对积分无贡献，对积分的贡献来自奇点，即图 7.10 中所示的"×"．于是得：

$$\begin{aligned}&\int\frac{d\omega}{2\pi i}f(\omega)\frac{1}{\omega-\omega'}\frac{2\Omega}{(i\omega_n-\omega)^2-\Omega^2}\\&=\frac{-2\Omega f(\omega')}{(i\omega_n-\omega')^2-\Omega^2}-\frac{f(i\omega_n+\Omega)}{i\omega_n+\Omega-\omega'}+\frac{f(i\omega_n-\Omega)}{i\omega_n-\Omega-\omega'}\end{aligned} \tag{7.7.22}$$

注意到

$$f(i\omega_n\pm\Omega)=\frac{1}{e^{i\beta\omega_n}e^{\pm\beta\Omega}+1}=\frac{1}{1-e^{\pm\beta\Omega}} \tag{7.7.23}$$

而若引入

$$n(\Omega)=\frac{1}{e^{\beta\Omega}-1} \tag{7.7.24}$$

则

$$f(i\omega_n\pm\Omega)=-n(\pm\Omega) \tag{7.7.25}$$

于是(7.7.22)式可写为(注意 $1+n(-\Omega)=-n(\Omega)$，$1-f(\omega')=$

$f(-\omega'))$

$$-[f(\omega')+n(\Omega)]\frac{1}{\omega'-\Omega-\mathrm{i}\omega_n}-[f(-\omega')+n(\Omega)]\frac{1}{\omega'+\Omega-\mathrm{i}\omega_n} \tag{7.7.26}$$

将(7.7.26)式代入(7.7.18)式,并将结果代回(7.7.15)式即得:

$$\Sigma_{\mathrm{ph}}(\boldsymbol{p},\omega)$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{\pi}\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}\Omega\int\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}\tau_3\mathrm{Im}G(\boldsymbol{p}',\ \omega'+\mathrm{i}\delta)\tau_3\sum_{\lambda}B_{\lambda}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}',\Omega)$$

$$\times\left|\frac{\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')g_{\lambda}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')}{\varepsilon(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')}\right|^2\left[\frac{f(-\omega')+n(\Omega)}{\omega'+\Omega-\omega}+\frac{f(\omega')+n(\Omega)}{\omega'-\Omega-\omega}\right] \tag{7.7.27}$$

在写下(7.7.27)式时已将原来的 $\mathrm{i}\omega_n$解析延拓到 $\omega(\mathrm{Im}\omega=0^+)$.

下面的问题是完成(7.7.27)式中的动量积分. 注意到我们感兴趣的 $\omega\lesssim\omega_{\mathrm{D}}\ll E_{\mathrm{F}}$, $\Omega\sim\omega_{\mathrm{D}}$, 于是(7.7.27) 式中对 ω'的积分贡献主要来自 $\omega'\lesssim\omega_{\mathrm{D}}$的范围. 而根据 G 的(7.7.9 形式看, 既然 $\omega'\lesssim\omega_{\mathrm{D}}$, 那么动量积分的主要贡献也是来自 $|\varepsilon_{p'}|\lesssim\omega_{\mathrm{D}}$. 既然积分主要来自靠近费密面的窄能壳内,那么可以证明:

$$\int\frac{\mathrm{d}^3p'}{(2\pi)^3}\approx N(0)\int\ \mathrm{d}\epsilon_{p'}\int q\frac{\mathrm{d}q}{2p_{\mathrm{F}}^2} \tag{7.7.28}$$

让我们来证明(7.7.28)式. 如图 7.11,以 $\boldsymbol{p}$ 为极轴,取球极坐标. 由图可见

$$q^2=p^2+p'^2-2pp'\cos\theta$$

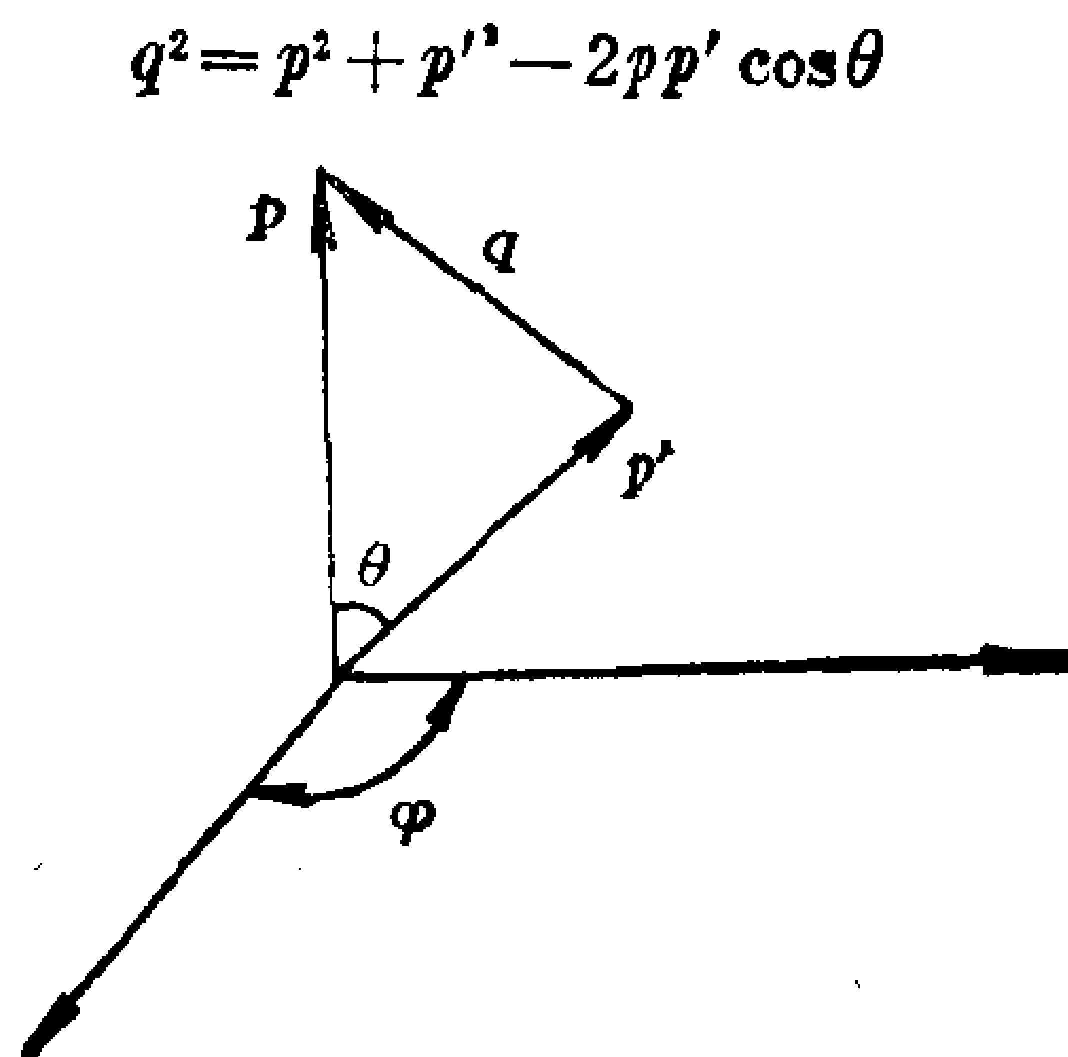


图 7.11 球极坐标图示

$\boldsymbol{p}$ 不变，先积分 θ 时，$\boldsymbol{p}'$ 亦不变，所以有

$$2q\mathrm{d}q \approx 2p_{\mathrm{F}}^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta$$

即

$$\frac{q\mathrm{d}q}{p_{\mathrm{F}}^2} = \sin\theta \mathrm{d}\theta$$

另外，在 p_{F} 附近有

$$\epsilon_{p'} \approx v_{\mathrm{F}}(p' - p_{\mathrm{F}})$$

$$\mathrm{d}\epsilon_{p'} = v_{\mathrm{F}} \mathrm{d}p'$$

所以

$$\int \frac{\mathrm{d}^3 p'}{(2\pi)^3} = \int \frac{p'^2 \mathrm{d}p' \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi}{(2\pi)^3} \approx \int \frac{p_{\mathrm{F}}^2}{2\pi^2} \mathrm{d}p' \frac{q\mathrm{d}q}{2p_{\mathrm{F}}^2}$$

$$= N(0) \int \mathrm{d}\varepsilon_{p'} \int q \frac{\mathrm{d}q}{2p_{\mathrm{F}}^2}$$

其中 $N(0) = \frac{mp_{\mathrm{F}}}{2\pi^2}$，此即证明了(7.7.28)式.

以(7.7.28)式进行(7.7.27)式中的动量积分则有：

$$\Sigma_{\mathrm{ph}}(\boldsymbol{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega'}{\pi} \int_0^{\infty} \mathrm{d}\Omega \int N(0) \mathrm{d}\varepsilon_{p'} \int q \frac{\mathrm{d}q}{2p_{\mathrm{F}}^2} \tau_3 \mathrm{Im} G(\boldsymbol{p}', \omega' + \mathrm{i}\delta) \tau_3$$
$$\times \sum_{\lambda} B(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}', \Omega) |\bar{g}_{\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}', \lambda}|^2 \left[\frac{f(-\omega') + n(\Omega)}{\omega' + \Omega - \omega} + \frac{f(\omega') + n(\Omega)}{\omega' - \Omega - \omega} \right]$$
$$= N(0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega'}{\pi} \int_0^{\infty} \mathrm{d}\Omega \int \mathrm{d}\epsilon_{p'} \tau_3 \mathrm{Im} G(\boldsymbol{p}', \omega' + \mathrm{i}\delta) \tau_3$$
$$\times \sum_{\lambda} \int_{FS} \frac{\mathrm{d}^2 p'}{4\pi p_{\mathrm{F}}^2} |\bar{g}_{\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}', \lambda}|^2 B_{\lambda}(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}', \Omega)$$
$$\times \left[\frac{f(-\omega') + n(\Omega)}{\omega' + \Omega - \omega} + \frac{f(\omega') + n(\Omega)}{\omega' - \Omega - \omega} \right] \qquad (7.7.29)$$

其中已将 $\mathrm{d}q$ 积分写为沿费密面上 $\boldsymbol{p}'$ 的平均：

$$\int \frac{q\mathrm{d}q}{2p_{\mathrm{F}}^2} = \int_{FS} \frac{\mathrm{d}^2 p'}{4\pi p_{\mathrm{F}}^2}$$

定义：

$$\sum_{\lambda}\int\frac{\mathrm{d}^2p'}{4\pi p_{\mathrm{F}}^2}|\bar{g}_{p,p',\lambda}|^2B_{\lambda}(p,p',\ \Omega)$$

$$\equiv\sum_{\lambda}\alpha_{p\lambda}^2F_{p\lambda}(\Omega)\equiv\alpha_p^2(\Omega)F_p(\Omega) \tag{7.7.30}$$

则可写

$$\Sigma_{\mathrm{ph}}(p,\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{\pi}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\Omega\alpha_p^2(\Omega)F_p(\Omega)$$
$$\int N(0)\mathrm{d}\varepsilon_{p'}\tau_3\mathrm{Im}G(p',\ \omega'+\mathrm{i}\delta)\tau_3$$
$$\times\left[\frac{f(-\omega')+n(\Omega)}{\omega'+\Omega-\omega}+\frac{f(\omega')+n(\Omega)}{\omega'-\Omega-\omega}\right] \tag{7.7.31}$$

假设在费密面附近的 $\epsilon_{p'}$ 具有粒子-空穴对称性，用(7.7.10)形式的 G 计算积分

$$\int\mathrm{d}\epsilon_{p'}\tau_3\mathrm{Im}G(p',\omega'+\mathrm{i}\delta)\tau_3$$

利用留数定理即得:

$$\Sigma_{\mathrm{ph}}(p,\omega)$$
$$=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\int_0^{\infty}\mathrm{d}\Omega\alpha_p^2(\Omega)F_p(\Omega)\mathrm{Re}\left\{\frac{\tau_3[\omega'\tilde{Z}(\omega')+\phi(\omega')\tau_1]\tau_3}{\sqrt{\omega'^2\tilde{Z}^2(\omega')-\phi^2(\omega')}}\right\}$$
$$\times\left[\frac{f(-\omega')+n(\Omega)}{\omega'+\Omega-\omega}+\frac{f(\omega')+n(\Omega)}{\omega'-\Omega-\omega}\right] \tag{7.7.32}$$

其中开方根定义为对于 $\mathrm{Im}\omega'>0$，开方具有正虚部. 在(7.7.32)式中的 $\phi(\omega')=\phi(p_{\mathrm{F}},\omega')$.

四、Σ_c的计算

在(7.7.14)中写下了库仑自能部分，其各分量分别为:

$$(1-Z_c(p,\mathrm{i}\omega_n))\mathrm{i}\omega_n$$
$$=-\frac{1}{\beta}\sum_{m,p'}\frac{V_{\mathrm{sc}}(p-p',\mathrm{i}\omega_n-\mathrm{i}\omega_m)\Delta Z(p',\mathrm{i}\omega_m)\mathrm{i}\omega_m}{[Z(p',\mathrm{i}\omega_m)\mathrm{i}\omega_m]^2-\varepsilon_{p'}^2-\phi^2(p',\mathrm{i}\omega_m)} \tag{7.7.33}$$

$$\chi_c(p,\mathrm{i}\omega_n)$$

$$=-\frac{1}{\beta}\sum_{m,p'}\frac{V_{sc}(p-p',i\omega_n-i\omega_m)\Lambda\varepsilon_{p'}}{[Z(p',i\omega_m)i\omega_m]^2-\varepsilon_{p'}^2-\phi^2(p',i\omega_m)} \tag{7.7.34}$$

$\phi_c(p,i\omega_n)$

$$=\frac{1}{\beta}\sum_{m,p'}\frac{V_{sc}(p-p',i\omega_n-i\omega_m)\Lambda\phi(p',i\omega_m)}{[Z(p',i\omega_m)i\omega_m]^2-\epsilon_{p'}^2-\phi^2(p',i\omega_m)} \tag{7.7.35}$$

现在计算$\phi_c(p, i\omega_n)$. 为此，仍像对Σ_{ph}的处理一样，先以(7.7.17)式代入(7.7.14)式得:

$$\begin{aligned}\Sigma_c(p)&=-\frac{1}{\beta}\sum_{m,p'}V_{sc}(p-p')\Lambda(p,p')\tau_3G(p',i\omega_m)\tau_3\\&=\frac{1}{\beta}\sum_{m,p'}V_{sc}(p-p')\Lambda(p,p')\tau_3\\&\quad\times\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\pi}\frac{\mathrm{Im}G(p',\omega'+i\delta)}{i\omega_m-\omega'}\tau_3\end{aligned} \tag{7.7.36}$$

这里第一个等号是对V_{sc}, Λ采用了静屏蔽近似，即忽略了其与ω的关系. 由此则

$$\Sigma_c(p,i\omega_n)\longrightarrow\Sigma_c(p)$$

当然随之有

$$\phi_c(p,i\omega_n)\longrightarrow\phi_c(p) \tag{7.7.37}$$

利用 Poisson 求和公式(7.7.19)即有:

$$\begin{aligned}&-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\pi}\sum_{p'}V_{sc}(p-p')\Lambda(p,p')\tau_3\mathrm{Im}G(p',\omega'+i\delta)\tau_3\left(-\frac{1}{\beta}\right)\\&\cdot\sum_m\frac{1}{i\omega_m-\omega'}\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\pi}\sum_{p'}V_{sc}(p-p')\Lambda(p,p')\tau_3\mathrm{Im}G(p',\omega'+i\delta)\tau_3f(\omega')\\&=\int_0^{\infty}\frac{d\omega'}{\pi}\sum_{p'}V_{sc}(p-p')\Lambda(p,p')\tau_3\mathrm{Im}G(p',-\omega'+i\delta)\tau_3f(-\omega')\\&+\int_0^{\infty}\frac{d\omega'}{\pi}\sum_{p'}V_{sc}(p-p)\Lambda(p,p')\tau_3\mathrm{Im}G(p',\omega'+i\delta)\tau_3f(\omega')\end{aligned} \tag{7.7.38}$$

相应的 ϕ_c 分量即可写为（注意 $\phi(-\omega')=\phi(\omega')$, $Z(-\omega')=Z(\omega')$）:

$$\phi_c(\boldsymbol{p}) = -\int_0^\infty \frac{d\omega'}{\pi}\int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')V_{sc}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')$$
$$\times \operatorname{Im}\left[\frac{\phi(\boldsymbol{p}',\omega')}{Z^2(\boldsymbol{p}',\omega')\omega'^2-\varepsilon_{p'}^2-\phi^2(\boldsymbol{p}',\omega')}\right][f(\omega')-f(-\omega')]$$
$$= \int_0^\infty \frac{d\omega'}{\pi}\int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')V_{sc}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')$$
$$\operatorname{Im}\left[\frac{\phi(\boldsymbol{p}',\omega')\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right)}{Z^2(\boldsymbol{p}',\omega')\omega'^2-\varepsilon_{p'}^2-\phi^2(\boldsymbol{p}',\omega')}\right] \tag{7.7.39}$$

上面最后一个等号利用了

$$f(\omega')-f(-\omega') = -\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right) \tag{7.7.40}$$

将(7.7.39)中的 ω' 积分分开为:

$$\int_0^\infty(\cdots)d\omega' = \int_0^{\omega_c}(\cdots)d\omega' + \int_{\omega_c}^\infty(\cdots)d\omega' \tag{7.7.41}$$

而取 $\omega_c\approx10\omega_D$. 对于在 (ω_c,∞) 区间中的积分，由于 $\omega_c\approx10\omega_D$，可以预期在这区间内声子对自能参量 Z, ϕ 的贡献可略，于是可写

$$Z=Z_c,\qquad \phi(\boldsymbol{p})\longrightarrow\phi_c(\boldsymbol{p}) \tag{7.7.42}$$

另外，在 (ω_c,∞) 区间，自然可设 $\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right)\approx1$，于是有:

$$\phi_c(\boldsymbol{p}) = \int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\ \frac{\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')V_{sc}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')}{Z_c^2}\int_0^{\omega_c}\frac{d\omega'}{\pi}$$
$$\operatorname{Im}\left[\frac{\phi(\boldsymbol{p}',\omega')}{\tilde{Z}^2(\omega')\omega'^2-\tilde{\varepsilon}_{p'}^2-\tilde{\phi}^2(\boldsymbol{p}',\omega')}\right]\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right)$$
$$+\int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\frac{\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')V_{sc}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')}{Z_c^2}\int_{\omega_c}^\infty\frac{d\omega'}{\pi}\operatorname{Im}\left[\frac{1}{\omega'^2-\tilde{\varepsilon}_{p'}^2+i\delta}\right]\phi_c(\boldsymbol{p}')$$
$$\tag{7.7.43}$$

其中

$$\tilde{Z}=\frac{Z}{Z_c} \quad (Z=Z_c\tilde{Z})$$

$$\tilde{\epsilon}_p=\frac{\epsilon_p}{Z_c} \tag{7.7.44}$$

$$\tilde{\phi}=\frac{\phi}{Z_c}$$

在(7.7.43)式右方第二个积分中完成对 ω' 的积分即得:

$$\phi_c(\boldsymbol{p})+\int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\frac{\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')V_{sc}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')}{Z_c^2}\frac{\theta(|\tilde{\epsilon}_{p'}|-\omega_c)}{2|\tilde{\epsilon}_{p'}|}\phi_c(\boldsymbol{p}')$$

$$=\int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\frac{\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')V_{sc}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')}{Z_c^2}\int_0^{\omega_c}\frac{d\omega'}{\pi}\mathrm{Im}$$

$$\cdot\left[\frac{\phi(\boldsymbol{p}',\omega')}{\tilde{Z}^2(\omega')\omega'^2-\tilde{\epsilon}_{p'}^2-\tilde{\phi}^2(\boldsymbol{p}',\omega')}\right]\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right) \tag{7.7.45}$$

与处理 Σ_{ph} 时相比,(7.7.45)式之突出点在于等式左方的第二项,这里的 θ 函数表明此项负责的散射是:以费密面为中心的 $2\omega_c$ 能壳之外的高能区.而右方的项则反映在此壳内的态间库仑散射.在 Σ_{ph} 中只有与后者相当的项,这是由于在(7.7.27)式中的声子能量分母使 ω' 积分自然截断在 ω_D.而在 Σ_c 中代替声子传播量的是 V_{sc},它并不提供于 ω_D 处截断,所以反映在(7.7.45)式中就多出来左方第二项.

如何进一步处理(7.7.45)式?下面引入赝位势.首先,(7.7.45)式可以形式地写为

$$(1+\Omega)\phi_c=VF \tag{7.7.46}$$

其中

$$\Omega_{pp'}=\frac{\theta(|\tilde{\epsilon}_{p'}|-\omega_c)\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')V_{sc}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')}{2|\tilde{\epsilon}_{p'}|Z_c^2} \tag{7.7.47}$$

$$V_{pp'}=\frac{\Lambda(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')V_{sc}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')}{Z_c^2} \tag{7.7.48}$$

$$F=\int_0^{\omega_c}\frac{d\omega'}{\pi}\mathrm{Im}\left[\frac{\phi(\boldsymbol{p}',\omega')}{\tilde{Z}^2(\boldsymbol{p}',\omega')\omega'^2-\tilde{\epsilon}_{p'}^2-\tilde{\phi}^2(\boldsymbol{p}',\omega')}\right]\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right) \tag{7.7.49}$$

在(7.7.46)—(7.7.49)式写法中用$\sum_{p'}$代替$\int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}$，下标$(p, p')$重复者表示求和.

(7.7.46)式又可写为

$$\phi_c = (1+\Omega)^{-1}VF \equiv UF \tag{7.7.50}$$

即

$$\phi_c(\boldsymbol{p}) = \int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}U(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')F(\boldsymbol{p}') \tag{7.7.51}$$

亦即

$$\phi_c(\boldsymbol{p}) = \int\frac{d^3p'}{(2\pi)^3}U(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')\int_0^{\omega_c}\frac{d\omega'}{\pi}\,\mathrm{Im}\left[\frac{\phi(\boldsymbol{p}',\omega')}{\tilde{Z}^2(\boldsymbol{p}',\omega')\omega'^2-\epsilon_{p'}^2-\tilde{\phi}^2(\boldsymbol{p}',\omega')}\right]\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right) \tag{7.7.52}$$

这表示由赝位势U决定ϕ_c的积分方程. 此式又可写为:

$$\phi_c(\boldsymbol{p}) = \int_0^{\omega_c}\frac{d\omega'}{\pi}N(0)\int\frac{d^2p'}{4\pi p_F^2}\int d\epsilon_{p'}U(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')\,\mathrm{Im}\left[\frac{\phi(\boldsymbol{p}',\omega')}{\tilde{Z}^2(\boldsymbol{p}',\omega')\omega'^2-\epsilon_{p'}^2-\tilde{\phi}^2(\boldsymbol{p}',\omega')}\right]\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right) \tag{7.7.53}$$

这是因为对赝位势而言，(7.7.52)式表明ω'的积分之主要贡献来自$\omega'\lesssim\omega_c\approx10\omega_D$. 这个$\omega'$的截断使得$d\epsilon_{p'}$的积分主要贡献也是来自$|\epsilon_{p''}|\lesssim\omega_c\approx10\omega_D$.

令

$$U(\boldsymbol{p}) \equiv \int\frac{d^2p'}{4\pi p_F^2}U(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}') \tag{7.7.54}$$

完成$d\epsilon_{p'}$的积分可近似地得:

$$\tilde{\phi}_c(\boldsymbol{p},\omega) = -N(0)U(\boldsymbol{p})\int_0^{\omega_c}d\omega'\,\mathrm{Re}\left\{\frac{\phi(p_F,\omega')\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right)}{\sqrt{\tilde{Z}^2(p_F,\omega')\omega'^2-\tilde{\phi}^2(p_F,\omega')}}\right\} \tag{7.7.55}$$

其中

$$\tilde{\phi}_{c}=\frac{\phi_{c}}{Z_{c}} \tag{7.7.56}$$

我们再对赝位势稍加讨论. 由(7.7.50)式可见其定义可写为

$$(1+\Omega)U=V \tag{7.7.57}$$

即

$$U+\Omega U=V$$

即

$$U(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')+\Omega_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}''}U_{\boldsymbol{p}''\boldsymbol{p}'}=V(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')$$

即

$$U(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')+\int\frac{\mathrm{d}^{3}p''}{(2\pi)^{3}}\frac{\theta(|\tilde{\epsilon}_{p''}|-\omega_{c})A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'')V_{sc}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'')}{2|\tilde{\epsilon}_{p''}|Z_{c}^{2}}\cdot U(\boldsymbol{p}'',\boldsymbol{p}')=V(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}') \tag{7.7.58}$$

或写为

$$U(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')=V(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')-\int\frac{\mathrm{d}^{3}p''}{(2\pi)^{3}}\frac{\theta(|\tilde{\epsilon}_{p''}|-\omega_{c})}{2|\tilde{\epsilon}_{p''}|}V(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'')U(\boldsymbol{p}'',\boldsymbol{p}') \tag{7.7.59}$$

其中利用了(7.7.48)式. 在脏极限下可取赝位势的 s 波平均:

$$U=\int_{\mathrm{FS}}\frac{\mathrm{d}^{2}p}{4\pi p_{\mathrm{F}}^{2}}U(\boldsymbol{p}) \tag{7.7.60}$$

对(7.7.59)式整个取 s-波平均则有

$$\langle U(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')\rangle_{s}=\langle V(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')\rangle_{s}-N(0)\int\mathrm{d}\tilde{\epsilon}_{p''}\theta(|\tilde{\epsilon}_{p''}|-\omega_{c})\times\langle V(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'')\rangle_{s}\langle U(\boldsymbol{p}'',\boldsymbol{p}')\rangle_{s}/2|\tilde{\epsilon}_{p''}| \tag{7.7.61}$$

如果设$\langle V(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')\rangle_{s}$ 取下列形式

$$V=\begin{cases}\langle V\rangle_{s}, & |\epsilon_{p'}|,|\epsilon_{p}|<E_{\mathrm{F}}\\ 0, & |\epsilon_{p'}|,|\epsilon_{p}|>E_{\mathrm{F}}\end{cases} \tag{7.7.62}$$

则(7.7.61)式变为

$$U=\langle V\rangle_{s}-2N(0)\langle V\rangle_{s}U\int_{\omega_{c}}^{E_{\mathrm{F}}}\frac{\mathrm{d}\tilde{\epsilon}_{p''}}{2\tilde{\epsilon}_{p''}}=\langle V\rangle_{s}-N(0)\langle V\rangle_{s}U\ln\frac{E_{\mathrm{F}}}{\omega_{c}}$$

或写为

$$U\left[1+N(0)\langle V\rangle_s \ln\frac{E_{\mathrm{F}}}{\omega_{\mathrm{c}}}\right]=\langle V\rangle_s$$

即

$$U=\frac{\langle V\rangle_s}{\left[1+N(0)\langle V\rangle_s \ln\left(\frac{E_{\mathrm{F}}}{\omega_{\mathrm{c}}}\right)\right]} \tag{7.7.63}$$

一般情况下，此式分母为2到3[22]．由此可见$U<\langle V\rangle_s$．赝位势考虑了远离费密面处两电子的多重库仑散射，这些多重散射减小了两电子在屏蔽库仑作用范围内的几率，这样，使得在靠近费密面所应用的有效库仑排斥比重正化屏蔽库仑作用沿费密面的平均值要小．

五、自能方程

现在在脏极限下将前面关于自能的方程总结一下，所谓脏极限这里意即取对费密面平均的相应结果．

取(7.7.32)式Σ_{ph}的τ_1分量以及(7.7.55)式合并而得出$\Delta(\omega)$的方程，$\Delta(\omega)$为

$$\Delta(\omega)=\frac{[\tilde{\phi}_{\mathrm{ph}}(\omega)+\tilde{\phi}_{\mathrm{c}}(\omega)]}{\tilde{Z}(\omega)}=\frac{\phi(\omega)}{\tilde{Z}(\omega)} \tag{7.7.64}$$

$\Delta(\omega)$满足方程：

$$\begin{aligned}\Delta(\omega)=&\frac{1}{Z(\omega)}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\omega'\,\mathrm{Re}\left\{\frac{\Delta(\omega')}{[\omega'^2-\Delta^2(\omega')]^{\frac{1}{2}}}\right\}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\Omega\,\alpha^2(\Omega)F(\Omega)\\&\times\left[\frac{f(-\omega')+n(\Omega)}{\omega'+\omega+\Omega}+\frac{f(-\omega')+n(\Omega)}{\omega'-\omega+\Omega}\right.\\&\left.-\frac{f(\omega')+n(\Omega)}{-\omega'+\omega+\Omega}-\frac{f(\omega')+n(\Omega)}{-\omega'-\omega+\Omega}\right]\\&-\frac{\mu^*}{Z(\omega)}\int_0^{\omega_c}\mathrm{d}\omega'\,\mathrm{Re}\left\{\frac{\Delta(\omega')}{[\omega'^2-\Delta^2(\omega')]^{\frac{1}{2}}}\right\}\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right)\end{aligned} \tag{7.7.65}$$

为简单起见，其中已将 $\tilde{Z}$ 写为 $Z(\omega)$. $\mu^*=N(0)U$. 在从(7.7.32)式改写为(7.7.65)式时，将(7.7.32)式中的$\int_{-\infty}^{\infty}(\cdots)d\omega'$已改化为用 $0\to\infty$ 的积分表达.

由(7.7.32)式同法可求出其重正化因子 $Z(\omega)$ 部分得：

$$[1-Z(\omega)]\omega=\int_0^{\infty}d\omega'\,\mathrm{Re}\left\{\frac{\omega'}{[\omega'^2-\Delta^2(\omega')]^{\frac{1}{2}}}\right\}\int_0^{\infty}d\Omega\alpha^2(\Omega)F(\Omega)$$

$$\times\left[\frac{f(-\omega')+n(\Omega)}{\omega'+\omega+\Omega}-\frac{f(-\omega')+n(\Omega)}{\omega'-\omega+\Omega}\right.$$

$$\left.+\frac{f(\omega')+n(\Omega)}{-\omega'+\omega+\Omega}-\frac{f(\omega')+n(\Omega)}{-\omega'-\omega+\Omega}\right] \quad (7.7.66)$$

(7.7.65)及(7.7.66)式就是自能方程，常称为 Eliashberg 方程.

六、McMillan 的超导转变温度公式[18]

应用 Eliashberg 方程，令被积函数分母中 $\Delta=0$ 即得：

$$\xi(\omega)\equiv[1-Z(\omega)]\omega=\int_0^{\infty}d\omega'\int_0^{\omega_0}d\omega_q\alpha^2(\omega_q)F(\omega_q)$$

$$\cdot\{[N(\omega_q)+f(-\omega')][(\omega'+\omega_q+\omega)^{-1}$$

$$-(\omega'+\omega_q-\omega)^{-1}]+[N(\omega_q)+f(\omega')]$$

$$\cdot[(-\omega'+\omega_q+\omega)^{-1}+(-\omega'+\omega_q-\omega)^{-1}]\} \quad (7.7.67)$$

$$\Delta(\omega)=[Z(\omega)]^{-1}\int_0^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega'}\mathrm{Re}[\Delta(\omega')]\int_0^{\omega_0}d\omega_q\alpha^2(\omega_q)F(\omega_q)$$

$$\times\{[N(\omega_q)+f(-\omega')][(\omega'+\omega_q+\omega)^{-1}$$

$$+(\omega'+\omega_q-\omega)^{-1}]-[N(\omega_q)+f(\omega')]$$

$$\times[(-\omega'+\omega_q+\omega)^{-1}+(-\omega'+\omega_q-\omega)^{-1}]\}$$

$$-\frac{N(0)V_c}{Z(\omega)}\int_0^{E_B}\frac{d\omega'}{\omega'}\mathrm{Re}[\Delta(\omega')][1-2f(\omega')] \quad (7.7.68)$$

在(7.7.67)及(7.7.68)式中我们采用了文献[18]中的符号，其中 ω_0 为最大声子频率. 与本节前面相比，符号改变为

$$\Omega \to \omega_q, \quad n(\Omega) \to N(\omega_q), \quad \omega_c \to E_B, \quad U \to V_c$$

还用了如下关系

$$\tanh\left(\frac{\beta\omega'}{2}\right) = 1 - 2f(\omega') = f(-\omega') - f(\omega') \tag{7.7.69}$$

McMillan 首次对(7.7.67)及(7.7.68)式作了近似计算. 他在方程中略去了 $N(\omega_q)$, 且取 Δ 的试探解 $\Delta_t(\omega)$ 形式如下:

$$\begin{aligned} \Delta_t(\omega) &= \Delta_0, \quad \text{当 } 0 < \omega < \omega_0 \\ &= \Delta_\infty, \quad \text{当 } \omega > \omega_0 \end{aligned} \tag{7.7.70}$$

以(7.7.70)形式代回公式(7.7.67)及(7.7.68)式可得出

$$\Delta(\omega = 0) = \Delta^1(0) + \Delta^2(0) \tag{7.7.71}$$

其中 $\Delta^1(0)$ 是(7.7.70)式中 Δ_0 的贡献:

$$\begin{aligned} \Delta'(0) &= [Z(0)]^{-1} \int_0^{\omega_0} \frac{d\omega'}{\omega'} \Delta_0 \int_0^{\omega_0} d\omega_q \alpha^2(\omega_q) F(\omega_q) \\ &\quad \cdot 2\{f(-\omega')(\omega' + \omega_q)^{-1} - f(\omega')(-\omega' + \omega_q)^{-1}\} \\ &\approx \frac{\Delta_0}{Z(0)} \int_0^{\omega_0} \frac{d\omega'}{\omega'} \tanh\left(\frac{\omega'}{2T_c}\right) 2 \int_0^{\omega_0} \frac{d\omega_q \alpha^2(\omega_q) F(\omega_q)}{\omega_q} \\ &\approx \left[\frac{\Delta_0 \lambda}{Z(0)}\right] \ln\left(\frac{\omega_0}{T_c}\right) \end{aligned} \tag{7.7.72}$$

其中

$$\lambda \equiv 2 \int_0^{\omega_0} \alpha^2(\omega_q) F(\omega_q) \frac{d\omega_q}{\omega_q} \tag{7.7.73}$$

(7.7.70)中 Δ_∞ 对于 $\Delta(\omega = 0)$ 的贡献为

$$\begin{aligned} \Delta^2(0) &= [Z(0)]^{-1} \int_{\omega_0}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega'} \Delta_\infty \int_0^{\omega_0} d\omega_q \alpha^2(\omega_q) F(\omega_q) \frac{2}{\omega' + \omega_q} \\ &\approx \left[\frac{\Delta_\infty}{Z(0)}\right] \frac{\langle\omega\rangle \lambda}{\omega_0} \end{aligned} \tag{7.7.74}$$

其中相对于 ω' 略去了 ω_q, 且

$$\langle\omega\rangle = \frac{\int_0^{\omega_0} d\omega_q \alpha^2(\omega_q) F(\omega_q)}{\int_0^{\omega_0} \frac{d\omega_q}{\omega_q} \alpha^2(\omega_q) F(\omega_q)} \tag{7.7.75}$$

(7.7.68)式中右方最后一项库仑作用对 $\Delta(0)$ 的贡献为

$$\Delta^3(0)=-\left[\frac{N(0)V_c}{Z(0)}\right]\left[\Delta_0\ln\left(\frac{\omega_0}{T_c}\right)+\Delta_\infty\ln\left(\frac{E_B}{\omega_0}\right)\right] \tag{7.7.76}$$

对于 $\Delta(\omega\to\infty)$，唯一贡献来自库仑项:

$$\Delta(\infty)=-\left[\frac{N(0)V_c}{Z(\infty)}\right]\left[\Delta_0\ln\left(\frac{\omega_0}{T_c}\right)+\Delta_\infty\ln\left(\frac{E_B}{\omega_0}\right)\right] \tag{7.7.77}$$

易于看出有:

$$\begin{aligned}Z(0)&=1+\lambda\\ Z(\infty)&=1\end{aligned} \tag{7.7.78}$$

为求出自洽解，要求:

$$\begin{aligned}\Delta(0)=\Delta_0=&\left[\frac{\Delta_0\lambda}{Z(0)}\right]\ln\left(\frac{\omega_0}{T_c}\right)+\left[\frac{\Delta_\infty}{Z(0)}\right]\frac{\langle\omega\rangle}{\omega_0}\lambda\\ &-\left[\frac{N(0)V_c}{Z(0)}\right]\left[\Delta_0\ln\left(\frac{\omega_0}{T_c}\right)+\Delta_\infty\ln\left(\frac{E_B}{\omega_0}\right)\right]\end{aligned} \tag{7.7.79}$$

另外要求

$$\begin{aligned}\Delta(\infty)=\Delta_\infty&=-N(0)V_c\left[\Delta_0\ln\left(\frac{\omega_0}{T_c}\right)+\Delta_\infty\ln\left(\frac{E_B}{\omega_0}\right)\right]\\ &=-\frac{N(0)V_c\Delta_0\ln\left(\frac{\omega_0}{T_c}\right)}{1+N(0)V_c\ln\left(\frac{E_B}{\omega_0}\right)}\\ &=-\mu^*\Delta_0\ln\left(\frac{\omega_0}{T_c}\right)\end{aligned} \tag{7.7.80}$$

其中定义

$$\mu^*=\frac{N(0)V_c}{1+N(0)V_c\ln\left(\frac{E_B}{\omega_0}\right)} \tag{7.7.81}$$

以(7.7.80)式代入(7.7.79)式得:

$$\Delta_0=\frac{\Delta_0\left[\lambda-\mu^*-\mu^*\lambda\left(\frac{\langle\omega\rangle}{\omega_0}\right)\right]\ln\left(\frac{\omega_0}{T_c}\right)}{1+\lambda} \tag{7.7.82}$$

由此得:

$$\frac{T_c}{\omega_0}=\exp\left(\frac{-(1+\lambda)}{\lambda-\mu^*-\left(\frac{\langle\omega\rangle}{\omega_0}\right)\lambda\mu^*}\right) \tag{7.7.83}$$

经过对一定数量的超导材料具体数值分析后,McMillan 半经验地定下如下的 T_c 公式:

$$T_c=\frac{\Theta_D}{1.45}\exp\left[-\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda-\mu^*(1+0.62\lambda)}\right] \tag{7.7.84}$$

这里采用德拜温度作为特征声子频率.

文献[23]指出自旋涨落对 T_c 的影响. 考虑自旋涨落影响后上式变为:

$$T_c=\frac{\Theta_D}{1.45}\exp\left\{-\frac{1.04(1+\lambda+\lambda_{spin})}{\lambda-\lambda_{spin}-\mu^*(1+0.62\lambda)}\right\} \tag{7.7.85}$$

其中 λ_{spin} 为自旋涨落参量,在文献[24]中从实验数据给出了许多过渡元素 λ_{spin} 值,并发现自旋涨落对 T_c 影响的大小随过渡元素在周期表上的位置有规律性变化. 文献[25][26][27]用McMillan 公式讨论了类稀土元素 La、Y等常压及高压下固体电子结构变化对 T_c 的影响.

参考文献

[1] H. Frölich, *Phys. Rev.*, **79**(1950)845; *Proc. Phys. Soc.* A63(1950) 778.

[2] L. N. Cooper, *Phys. Rev.*, **104**(1956)1189.

[3] J. Bardeen, L. N. Cooper, *J. R. Schrieffer*, *Phys. Rev.*, **108**(1957) 1175.

[4] L. P. Gorkov, ЖЭТФ**34**(1958)735.

[5] A. Messiah, *Quantum Mechanics* Vol II Chap XX §20. *North-Holland Publishing Company*, Amsterdam. Translated from the French by J. Potter(1970)p. 918.

[6] А. А. Абрикосов, Л. П. Горвков, И. Е. Дзялошинский, *Меоды Кьантовой Теории поля В Статисти Ческой Физике.*
[7] 章立源,张金龙,崔广霁, 超导物理(电子工业出版社, 1987年出版)第三章.
[8] A. B. Pippard, *Proc. Roy. Soc.*, A**216**(1953)547.
[9] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, *ЖЭТФ* 20(1950)1064.
[10] L. D. Landau, *Phys. Zeit. Sowjet*, **11**(1937)26.
[11] 见文献[7]第六章.
[12] L. P. Gorkov, *ЖЭТФ* **36**(1959)1918.
[13] 汤蕙,章立源, *Solid State Commun.* **54**(1985)1.
参见:章立源,物理学报 **32**(1983)1435.
[14] J. M. Rowell and L. Kopf, *Phys. Rev.*, **137**(1965)907.
[15] S. Bermon and D. M. Ginsberg, *Phys. Rev.*, **135**(1964)*A*306.
[16] G. Bergmann, *Phys. Reports*, **27**c(1976), 1
[17] G. M. Eliashberg, *ЖЭТФ* **38**(1960)966.
[18] W. L. McMillan, *Phys. Rev.* **167**(1968)331.
[19] Y. Nambu, *Phys. Rev.*, **117**(1960)648.
[20] J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Chep. 7.
[21] E. G. Batyev, *ЖЭТФ* **46**(1964)262.
[22] N. N. Bogoliubov, *Nuovo Cimento* **7**(1958)6, 794.
[23] N. F. Berk and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.*, Lett **17**(1966)433.
[24] 张侠,章立源,低温物理学报 **8**(1986)112.
[25] 章立源,韩汝珊,张玉林, 低温物理学报 **4**(1982)269 (亦可见 *Chinese*
[26] *Physics*, **3**(1983)484.)
申江,章立源,低温物理学报 **7**(1985)169.
[27] 章立源, *Chinese Phys. Lett.*, **4**, No. **7**(1987)297.

第八章　固体的磁性

本章只讨论有序磁态问题．首要的问题在于找出对产生磁性起重要作用的哈密顿量．至今有三个模型哈密顿量很有用．一是海森堡(Heisenberg)模型哈密顿量，二是Hubbard模型哈密顿量，前者宜于用来研究磁绝缘体，后者宜于研究金属中的磁性．第三个模型哈密顿量是Anderson模型哈密顿量，它是用来研究金属中的局域化磁态的．在上述Anderson哈密顿量的基础上近年又提出了Anderson周期模型哈密顿量，宜于研究稀土及锕系晶体金属磁性问题．本章重点放在Hubbard及Anderson哈密顿量．对Heisenberg哈密顿量只作简要介绍．对Anderson周期模型哈密顿量则只引文献供有兴趣者选读．

§8.1　Heisenberg铁磁模型

设以$\boldsymbol{S}_i$表示处于格位i上的自旋，并设各格位自旋之间有一种相互作用，它倾向于使诸自旋平行排列．Heisenberg磁模型哈密顿量为

$$H=-g\mu_{\mathrm{B}}\sum_{i}\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{S}_i-\sum_{i,j}J_{ij}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j \tag{8.1.1}$$

其中J_{ij}是格位i及j上自旋之间的耦合强度，一般说，它随两自旋之间的距离而迅速衰减．(8.1.1)式中第一项是外磁场对系统自旋之影响．当J_{ij}到处均为正时，(8.1.1)式哈密顿的基态是所有自旋指向磁场方向的态．

选外磁场方向为z方向，则根据量子力学有如下关系：

$$S_z|s\rangle=s|s\rangle \tag{8.1.2}$$

其中$|s\rangle$代表S_z的本征态，s取值为

$$s=-S,-S+1,\cdots,S-1,S \tag{8.1.3}$$

其中 S 为质点的自旋，有

$$S^2\equiv S_x^2+S_y^2+S_z^2=S(S+1) \tag{8.1.4}$$

定义

$$S_i^+=S_{ix}+\mathrm{i}S_{iy} \tag{8.1.5}$$

$$S_i^-=S_{ix}-\mathrm{i}S_{iy} \tag{8.1.6}$$

易证有下列关系

$$[S_{iz},S_j^+]=S_i^+\delta_{ij} \tag{8.1.7}$$

$$[S_{iz},S_j^-]=-S_i^-\delta_{ij} \tag{8.1.8}$$

$$S^+|s\rangle\propto|s+1\rangle \tag{8.1.9}$$

$$S^-|s\rangle\propto|s-1\rangle \tag{8.1.10}$$

$$S^+|S\rangle=0 \tag{8.1.11}$$

$$S^-|-S\rangle=0 \tag{8.1.12}$$

此外注意

$$[\boldsymbol{S}_i,\boldsymbol{S}_j]=0,\qquad i\neq j \tag{8.1.13}$$

系统的基态可写为

$$|0\rangle=\prod_i|S\rangle_i \tag{8.1.14}$$

其中 $|s\rangle_i$ 表示第 i 个自旋的态，$|S\rangle_i$ 表示第 i 个自旋处于 S_z 的最大本征值的态．因此，利用(8.1.11)可见：

$$S_i^+|0\rangle=0,(\text{对所有 } i) \tag{8.1.15}$$

由此可见，

$$H|0\rangle=\left[-g\mu_{\mathrm{B}}SH-S^2\sum_{i,j}J_{ij}\right]|0\rangle \tag{8.1.16}$$

这表示 $|0\rangle$ 是 H 的本征态．不难看出，若所有的 J_{ij} 均为正，则 $|0\rangle$ 的能量本征值最小，即态 $|0\rangle$ 为基态．

在有限温度下难于精确处理(8.1.1)式哈密顿量．一般假设，

在有限温度下，每一自旋在沿磁场方向有一有限大小的平均值，并近似略去围绕平均值的自旋涨落的二次项. 于是，与(8.1.1)式对应的线性化了的哈密顿量为:

$$H=-g\mu_B H\sum_i S_{iz}-2\sum_{i,j}J_{ij}\langle S_{iz}\rangle S_{jz}+\sum_{i,j}J_{ij}\langle S_{iz}\rangle\langle S_{jz}\rangle \tag{8.1.17}$$

这又可写为:

$$H=-g\mu_B H_{\text{eff}}\sum_i S_{iz}+\sum_{i,j}J_{ij}\langle S_{iz}\rangle\langle S_{jz}\rangle \tag{8.1.18}$$

其中

$$g\mu_B H_{\text{eff}}=g\mu_B H+2\sum_i J_{ij}\langle S_{iz}\rangle \tag{8.1.19}$$

很明显，H_{eff} 表示每个自旋既受外磁场 H 的影响，又受有来自其它自旋的平均场的影响，这叫分子场近似. 对于均匀系统 H_{eff} 应与坐标无关，$\langle S_{iz}\rangle$ 也应与 i 无关. 于是有:

$$\langle S_z\rangle=\langle S_{iz}\rangle=\frac{\sum\limits_{s=-S}^{S}s\exp[\beta g\mu_B H_{\text{eff}}s]}{\sum\limits_{s=-S}^{S}\exp[\beta g\mu_B H_{\text{eff}}s]} \tag{8.1.20}$$

对于 $S=\frac{1}{2}$ 特例可算出有下列结果:

$$\langle S_z\rangle=\frac{1}{2}\tanh\left[\frac{1}{2}\ \beta g\mu_B H_{\text{eff}}\right] \tag{8.1.21}$$

若当外磁场为零时此方程有非零 $\langle S_z\rangle$ 解，则表示有自发磁矩. 事实上，在外场为零时，(8.1.21)化为:

$$\langle S_z\rangle=\frac{1}{2}\tanh(\beta J_0\langle S_z\rangle) \tag{8.1.22}$$

其中

$$J_0=\sum_j J_{ij} \tag{8.1.23}$$

用作图法求解(8.1.22)式发现当

$$\frac{1}{2}J_0\beta\geqslant 1 \tag{8.1.24}$$

时，方程(8.1.22)确有非零解. (8.1.24)式又可写为

$$T\leqslant T_c \tag{8.1.25}$$

其中

$$T_c=\frac{1}{2}J_0/k_B \tag{8.1.26}$$

因此得到，在临界温度 T_c 之下，晶体有自发磁化，其磁矩由下式计算：

$$M_z=\rho g\mu_B\langle S_z\rangle \tag{8.1.27}$$

ρ 为自旋数密度. 图 8.1 表示数值解结果. 在 $T=0K$ 有正确的饱和磁行为，但在高温处定量符合不好. 定性地讲，将(8.1.22)式右方展开可近似得：

$$M\propto[(T_c-T)/T_c]^{\frac{1}{2}} \tag{8.1.28}$$

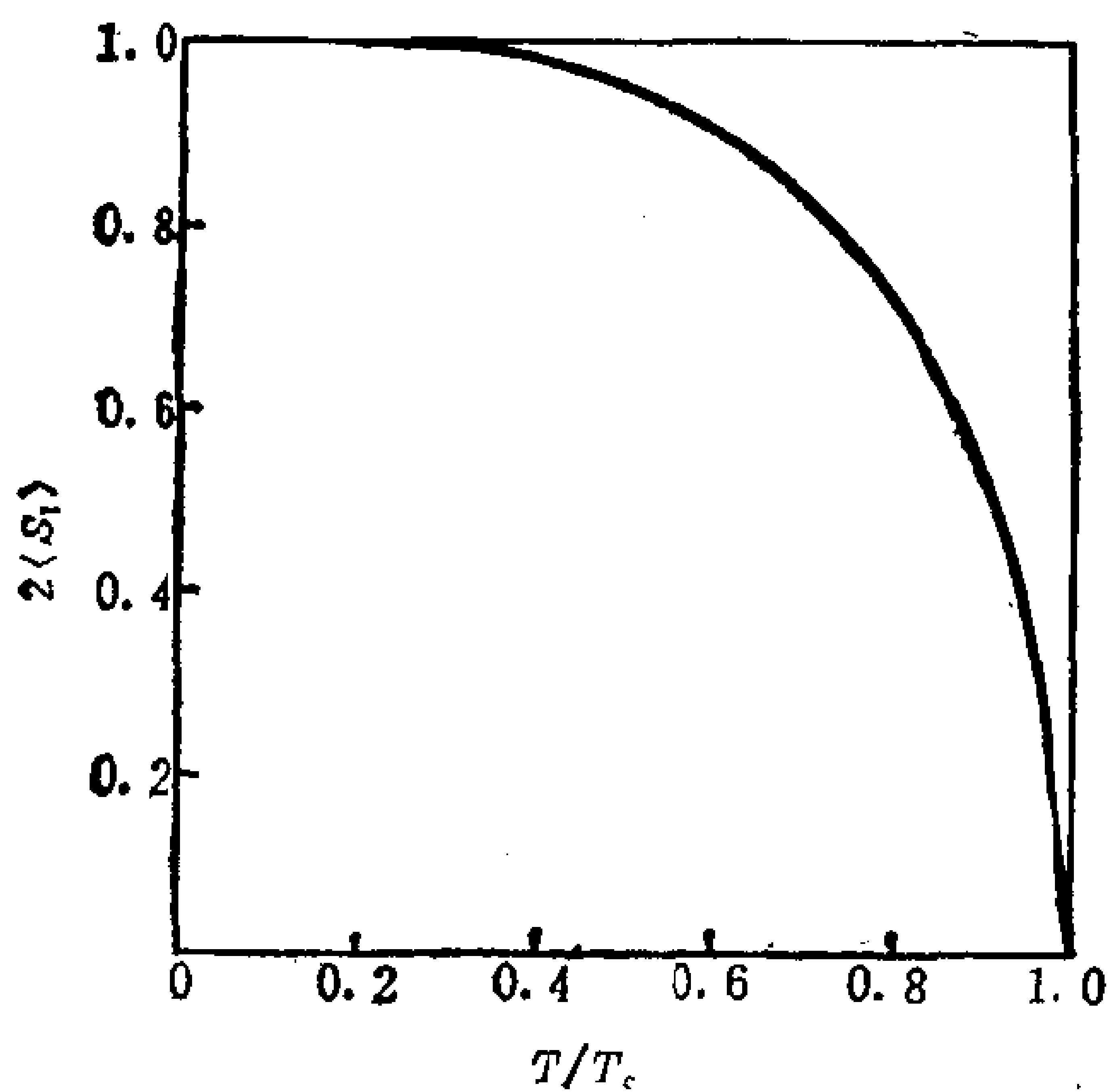


图 8.1 对自旋 $\frac{1}{2}$ 系统由分子场理论得到的自发磁矩与饱和矩比率随温度关系.

模型哈密顿量(8.1.18)及(8.1.19)式对在较高温度下所得磁矩不甚理想的原因在于：在(8.1.18)及(8.1.19)式中已略去了(8.1.1)式中的 S_x, S_y 项. 但由于

$$S_x^2+S_y^2+S_z^2=S(S+1)$$

因此，当温度升高从而 S_z 减小时, S_x, S_y 必然增长以致在高温下略去它们的贡献是不合适的. 较之(8.1.18)及(8.1.19)式改善了的哈密顿量可写为:

$$H=-g\mu_B H_{\text{eff}}\sum_i S_{iz}+\sum_{i,j} J_{ij}\langle S_{iz}\rangle\langle S_{jz}\rangle \\ -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}(S_i^+S_j^-+S_i^-S_j^+) \tag{8.1.29}$$

其中

$$g\mu_B H_{\text{eff}}=2\sum_j J_{ij}\langle S_{jz}\rangle=2\langle S_z\rangle\sum_j J_{ij} \tag{8.1.30}$$

这是在外磁场为零下写的. 可采用格林函数技术在此哈密顿量下进行计算,读者可以参看[1].

最后我们指出用分子场近似也可计算反铁磁性及亚铁磁性. 图 8.2 示意表示反铁磁体基态的自旋排列. 自旋在两个亚点阵中

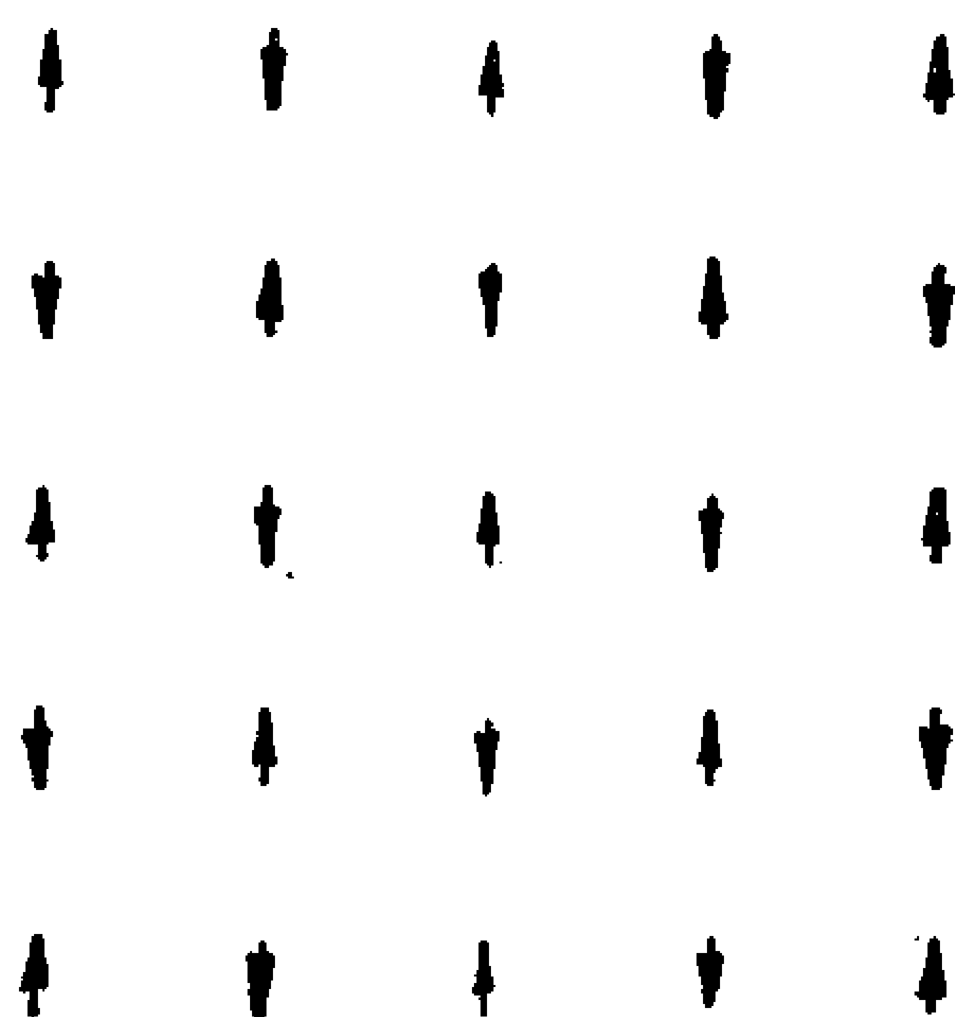


图 8.2 反铁磁基态自旋排列

的每一个都是倾向于平行排列的，但是在两个亚点阵上的净磁矩恰恰彼此相消. 亚铁磁性和反铁磁性相仿，即在一转变温度下，自旋在两个(或更多)亚点阵中倾向于平行排列，但亚铁磁的特点是，在这些亚点阵上的净磁矩并不彼此相消，从而仍有自发磁矩存在. 对反铁磁性(或亚铁磁性)的处理方法是考虑两个(或更多)亚点阵，在每一亚点阵中可像铁磁系统那样处理，对两个亚点阵分别列出方程再联立计算求解.

§8.2 Hubbard 模型

在一般金属中，其中诸自旋可以运动，需要提出基于能带结构的固体磁性模型. Hubbard 1963 年提出了这样的一个简单模型[2]. Hubbard 哈密顿量是:

$$H=\sum_{i,j}\sum_{\sigma}T_{ij}C^{+}_{i\sigma}C_{j\sigma}+\frac{1}{2}I\sum_{i,\sigma}n_{i\sigma}n_{i,-\sigma} \tag{8.2.1}$$

其中

$$n_{i\sigma}=C^{+}_{i\sigma}C_{i\sigma} \tag{8.2.2}$$

$C^{+}_{i\sigma}$ 表示产生算符，它在格位 i 产生一个处于 Wannier 态的电子，自旋为 σ. T_{ij} 为

$$T_{ij}=\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_i-\boldsymbol{R}_j)] \tag{8.2.3}$$

$\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ 为 Bloch 带能. (8.2.3)描写一个电子自格位 i 到格位 j 的跃徙(*hopping*).

$$\begin{aligned}I&=\langle ii|Vii\rangle\\&=\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{x}'\varphi^*(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_i)\varphi(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_i)V\varphi^*(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{R}_i)\varphi(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{R}_i)\end{aligned} \tag{8.2.4}$$

V 为库仑排斥位势. I 表示在同一格位上相反自旋的电子间的排斥相互作用. 因为我们考虑的是巡游电子情况，因此可以预期屏

蔽效应将限制此排斥相互作用主要是在同一格位范围.

哈密顿量(8.2.1)与早先提出的 Stoner 模型[3]在物理实质上是一样的. Hubbard 的进展在于用此模型研究了关联效应. 下面我们先讲平均场近似下的解,再讨论关联效应问题.

一、Hartree-Fock 近似(H-F)

先要写出有效的、H-F 哈密顿量. 这就是把 (8.2.1)式中的相互作用项"线性化",即取:

$$n_{i\sigma}n_{i,-\sigma}\longrightarrow n_{i\sigma}\langle n_{i,-\sigma}\rangle+n_{i,-\sigma}\langle n_{i\sigma}\rangle \tag{8.2.5}$$

其中$\langle n_{i\sigma}\rangle$表示在温度$T$下 $n_{i\sigma}$ 的系综平均值. 以此代入(8.2.1)即得:

$$H_{\text{ef}}=\sum_{i,j}\sum_{\sigma}T_{ij}C_{i\sigma}^{+}C_{j\sigma}+I\sum_{i,\sigma}n_{i\sigma}\langle n_{i,-\sigma}\rangle \tag{8.2.6}$$

设求具有平移不变性的解,则对所有的 i 应有:

$$\langle n_{i\sigma}\rangle=n_{\sigma} \tag{8.2.7}$$

于是(8.2.6)化为

$$H_{\text{ef}}=\sum_{i,j}\sum_{\sigma}T_{ij}C_{i\sigma}^{+}C_{j\sigma}+I\sum_{i,\sigma}n_{-\sigma}C_{i\sigma}^{+}C_{i\sigma} \tag{8.2.8}$$

回到动量表象即得

$$H_{\text{ef}}=\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\sigma}\{\epsilon_{\boldsymbol{k}}+In_{-\sigma}\}C_{\boldsymbol{k}\sigma}^{+}C_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{8.2.9}$$

从形式上看这又还原为非相互作用的电子系集，只是把带能修正了,$(\boldsymbol{k},\sigma)$态的能量现在修正为

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}}+In_{-\sigma} \tag{8.2.10}$$

注意,对自旋向上的电子,具有能量 $\epsilon_{\boldsymbol{k}}+I\langle n\downarrow\rangle$, 而自旋向下的电子具有能量 $\epsilon_{\boldsymbol{k}}+I\langle n_{\uparrow}\rangle$. 值得强调,不同自旋只由其它自旋所导致的平均场所影响.

决定$\langle n\uparrow\rangle$及$\langle n\downarrow\rangle$的自洽方程为:

$$\langle n\uparrow\rangle=\int \mathrm{d}\epsilon N(\epsilon)f[\epsilon+I\langle n\downarrow\rangle] \tag{8.2.11}$$

$$\langle n\downarrow\rangle=\int \mathrm{d}\epsilon N(\epsilon)f[\epsilon+I\langle n\uparrow\rangle] \tag{8.2.12}$$

$$n=\langle n\uparrow\rangle+\langle n\downarrow\rangle \tag{8.2.13}$$

其中$N(\epsilon)$表示未受微扰带的态密度，$f(x)$为Fermi-Dirac分布函数. ϵ_k自化学势μ计起. (8.2.11), (8.2.12)及(8.2.13)可以确定μ,$\langle n\uparrow\rangle$及$\langle n\downarrow\rangle$.

易于看出(8.2.11)—(8.2.13)式具有

$$\langle n\uparrow\rangle=\langle n\downarrow\rangle=\frac{1}{2}n \tag{8.2.14}$$

的非磁解.

现在讨论一下(8.2.11)－(8.2.13)式是否具有铁磁解. 为简单起见讨论具有弱铁磁性的解:

$$\begin{aligned}\langle n\uparrow\rangle&=\frac{1}{2}n+x\\ \langle n\downarrow\rangle&=\frac{1}{2}n-x\end{aligned} \tag{8.2.15}$$

(设x为小量),设

$$f(\epsilon)\approx\theta(-\epsilon) \tag{8.2.16}$$

作换元

$$\epsilon=\xi-\mu \tag{8.2.17}$$

ξ表示自带底计起的带能. 以(8.2.15)及(8.2.16)式代入(8.2.11)及(8.2.12)式,对其中的$N(\xi)$作Taylor级数展开，然后进行积分即得到关于$\frac{1}{2}n+x$与$\frac{1}{2}n-x$两个方程. 将此两方程重新组合即可写:

$$\frac{1}{2}n\approx\int_0^{\mu-\frac{1}{2}In}\mathrm{d}\xi N(\xi)+\frac{1}{2}I^2x^2N'\left(\mu-\frac{1}{2}In\right) \tag{8.2.18}$$

$$x\left[1-IN\left(\mu-\frac{1}{2}In\right)\right]\approx\frac{1}{6}I^3x^3N''\left(\mu-\frac{1}{2}In\right) \tag{8.2.19}$$

由此可见，若存在满足

$$IN(\xi_0)=1,\quad N''(\xi_0)\neq 0 \tag{8.2.20}$$

的带能，那么选$\left(\mu-\frac{1}{2}In\right)$近于$\xi_0$就可由方程(8.2.19)式得到$x$的非零解$\left(取\left(\mu-\frac{1}{2}In\right)固定\right)$，然后由(8.2.18)式即可确定$n$. 于是，对于某些$n$, μ，平均场理论预言系统有铁磁性，其条件是(8.2.20). 这就是巡回磁性态. 当然，在以上 Hartree-Fock 近似中略去了局域关联，下面讨论包含关联时如何解决这个问题，为此先简单介绍一下 Zubarev 格林函数技术[4].

二、Zubarev 技术

定义算符$A(t)$, $B(t')$的推迟格林函数为:

$$\begin{aligned}G^{\mathrm{R}}(t,t')&\equiv\langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle^{(+)}\\&=-\mathrm{i}\theta(t-t')\langle[A(t),B(t')]_\eta\rangle\end{aligned} \tag{8.2.21}$$

其中

$$[A,B]_\eta=AB-\eta BA \tag{8.2.22}$$
$$\eta=\pm1$$

$\eta=+1$对应于费密子，$\eta=-1$对应于玻色子. $\langle\cdots\rangle$表示对系综平均. 而

$$A(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}A(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}\quad(\hbar=1) \tag{8.2.23}$$

同理定义超前格林函数

$$G^{\mathrm{A}}(t,t')\equiv\langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle^{(-)}=\mathrm{i}\theta(t'-t)\langle[A(t),B(t')]_\eta\rangle \tag{8.2.24}$$

利用 Heisenberg 算符的运动方程，与在§7.3小字中证明(7.3.8)式的方法相仿可证明:

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle^{(\pm)}=\delta(t-t')\langle[A(t),B(t)]_\eta\rangle$$
$$+\langle\langle[A(t),H];B(t')\rangle\rangle^{(\pm)}$$
$$(8.2.25)$$

注意,G^{R},G^{A} 只是 t-t' 的函数,对实数 E 定义傅里叶变换为

$$G^{\mathrm{R}}(E)\equiv\langle\langle A;B\rangle\rangle_E^{(+)}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\langle\langle A(t);B(0)\rangle\rangle^{(+)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et}\mathrm{d}t \tag{8.2.26}$$

同理有

$$G^{\mathrm{A}}(E)\equiv\langle\langle A;B\rangle\rangle_E^{(-)}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\langle\langle A(t);B(0)\rangle\rangle^{(-)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et}\mathrm{d}t \tag{8.2.27}$$

推迟和超前格林函数使用起来很方便，其原因之一在于它们在复 E 平面的解析性质．Zubarev 证明：$G^{\mathrm{R}}(E)$ 可以解析延拓到复 E 平面的上半平面($\mathrm{Im}E>0$)，而 $G^{\mathrm{A}}(E)$ 可以解析延拓到复 E 平面的下半平面($\mathrm{Im}E<0$)．于是人们可以定义：

$$\begin{aligned}G(E)\equiv\langle\langle A;B\rangle\rangle_E&=\langle\langle A;B\rangle\rangle_E^{(+)},\quad \text{若 } \mathrm{Im}E>0\\&=\langle\langle A;B\rangle\rangle_E^{(-)},\quad \text{若 } \mathrm{Im}E<0\end{aligned} \tag{8.2.28}$$

除去实轴外,$\langle\langle A;B\rangle\rangle_E$ 是整个复 E 平面的解析函数.

利用(8.2.25)及下式:

$$\langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle^{(\pm)}=\int_{-\infty}^{\infty}\langle\langle A;B\rangle\rangle_E^{(\pm)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t')}\mathrm{d}E \tag{8.2.29}$$

$$\delta(t-t')=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t')}\mathrm{d}E \tag{8.2.30}$$

则可得:

$$EG(E)=\frac{1}{2\pi}\langle[A,B]_\eta\rangle+\langle\langle[A,H];B\rangle\rangle_E \tag{8.2.31}$$

Zubarev 还证明了关联函数与格林函数(8.2.28)式有如下关系:

$$\langle B(t')A(t)\rangle = \mathrm{i}\lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}[\langle\langle A;B\rangle\rangle_{E+\mathrm{i}\epsilon}-\langle\langle A;B\rangle\rangle_{E-\mathrm{i}\epsilon}]$$

$$\cdot\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t')}}{\mathrm{e}^{\beta(E-\mu)}-\eta}\mathrm{d}E \qquad (8.2.32)^*$$

(8.2.25)或(8.2.31)式一般不易求得严格解，一般需作截断(类似于第七章中的 Gorkov 假设)，而对于如何截断也尚无一般方法. 下面讲 Hubbard 关联问题例.

三、计及关联时格林函数的近似解

现在在哈密顿量(8.2.1)下计算格林函数 $G_{ij}(E)$所满足的方程，这里 $G_{ij}(E)$的定义是:

$$G_{ij}(E)=\langle\langle C_{i\sigma};C_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle_E \quad (\eta=-1) \qquad (8.2.28')$$

计算 $G_{ij}(E)$所满足的方程就在于计算(8.2.31)式右方诸项. 易于看出有:

$$[C_{i\sigma},H]=\sum_j T_{ij}C_{j\sigma}+In_{i,-\sigma}C_{i\sigma} \qquad (8.2.33)$$

所以，由(8.2.31)式得出 G_{ij} 满足下列方程:

$$EG_{ij}(E)=\frac{1}{2\pi}\delta_{ij}+\sum_k T_{ik}G_{kj}(E)+I\Gamma_{ij} \qquad (8.2.34)$$

其中

$$\Gamma_{ij}(E)\equiv\langle\langle n_{i,-\sigma}C_{i\sigma};C_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle_E \qquad (8.2.35)$$

注意(8.2.34)中的 k 表示第 k 个格位. 注意到

$$[n_{i\sigma},H]=\sum_j T_{ij}(C_{j\sigma}^{+}C_{j\sigma}-C_{j\sigma}^{+}C_{i\sigma}) \qquad (8.2.36)$$

$$[n_{i,-\sigma}C_{i\sigma},C_{j\sigma}^{+}]_{+}=\delta_{ij}n_{i,-\sigma} \qquad (8.2.37)$$

$$n_{i,-\sigma}^2=n_{i,-\sigma} \qquad (8.2.38)$$

---

* 本章附录给出了(8.2.32)式的证明.

由(8.2.31)得出 $\Gamma_{ij}(E)$满足下列方程:

$$
\begin{aligned}
E\Gamma_{ij}(E)=&\frac{1}{2\pi}\delta_{ij}\langle n_{i,-\sigma}\rangle+T_0\Gamma_{ij}+I\Gamma_{ij}\\
&+\sum_{k\neq i}T_{ik}\langle\langle n_{i,-\sigma}C_{k\sigma};C_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle_E\\
&+\sum_{k\neq i}T_{ik}\{\langle\langle C_{i,-\sigma}^{+}C_{k,-\sigma}C_{i\sigma};C_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle_E\\
&-\langle\langle C_{k,-\sigma}^{+}C_{i,-\sigma}C_{i\sigma};C_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle_E\}
\end{aligned}
\tag{8.2.39}
$$

其中

$$
T_0=N^{-1}\sum_k\epsilon_k \tag{8.2.40}
$$

代表平均带能，而(8.2.39)式中的第二项是从第4项中分出来的 $k=i$ 部分. 在零带宽极限(原子极限)下,$T_{ij}=T_0\delta_{ij}$(或 $\epsilon_k=T_0$),这时(8.2.39)式右方末两项消失. 于是在原子极限下由(8.2.39)可得 Γ_{ij} 的精确解;

$$
\Gamma_{ij}^{(0)}(E)=\frac{1}{2\pi}\delta_{ij}\frac{\langle n_{i,-\sigma}\rangle}{E-T_0-I} \tag{8.2.41}
$$

其中 $\Gamma_{ij}^{(0)}$的上标表示零带宽极限. 在这极限下以(8.2.41)代入(8.2.34)式可得 G_{ij} 的精确解.

然而，在一般情况下 Γ_{ij} 由(8.2.39)式确定. 若以之代回(8.2.34)式则需考虑在(8.2.39)式右方末项所引入的四算符格林函数. 这样会导致一系列格林函数,其方程组无法求解.

为了破坏格林函数方程组这一无限序列，必须对(8.2.39)式右方末两项取近似,以“截断”这个方程组. Zubarev 假设:

$$
\langle\langle n_{i,-\sigma}C_{k\sigma};C_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle_E\approx\langle n_{i,-\sigma}\rangle G_{kj}(E) \tag{8.2.42}
$$

$$
\langle\langle C_{i,-\sigma}^{+}C_{k,-\sigma}C_{i\sigma};C_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle_E\approx\langle C_{i,-\sigma}^{+}C_{k,-\sigma}\rangle G_{ij}(E) \tag{8.2.43}
$$

$$
\langle\langle C_{k,-\sigma}^{+}C_{i,-\sigma}C_{i\sigma};C_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle_E\approx\langle C_{k,-\sigma}^{+}C_{i,-\sigma}\rangle G_{ij}(E) \tag{8.2.44}
$$

利用 (8.2.43) 及 (8.2.44) 式并考虑到平移对称性则可以看出

(8.2.39)式中最后一项消失，这是因为：

$$\sum_{\substack{k \\ k\neq i}} T_{ik}\langle C_{i,-\sigma}^{+}C_{k,-\sigma}\rangle=\frac{1}{N}\sum_{i,k}{}' T_{ik}\langle C_{i,-\sigma}^{+}C_{k,-\sigma}\rangle$$

$$=\frac{1}{N}\sum_{i,k}{}' T_{ki}\langle C_{k,-\sigma}^{+}C_{i,-\sigma}\rangle=\frac{1}{N}\sum_{i,k}{}' T_{ik}\langle C_{k,-\sigma}^{+}C_{i,-\sigma}\rangle$$

$$=\sum_{\substack{k \\ k\neq i}} T_{ik}\langle C_{k,-\sigma}^{+}C_{i,-\sigma}\rangle$$

其中第三个等号用了 $T_{ik}=T_{ki}$，因为 $\epsilon_{k}=\epsilon_{-k}$，由(8.2.3)式立即可看出有这个关系。

下面设

$$\langle n_{i\sigma}\rangle=n_{\sigma} \tag{8.2.45}$$

即认为系统具有平移对称性. 在条件(8.2.45)下可以讨论非磁解与铁磁解. 对于反铁磁性则不能使用(8.2.45)式，读者可以参考文献[5]. 在(8.2.45)条件下以(8.2.42)—(8.2.44)式代入(8.2.39)式即得：

$$E\Gamma_{ij}=n_{-\sigma}\frac{\delta_{ij}}{2\pi}+(T_0+I)\Gamma_{ij}+n_{-\sigma}\sum_{k\neq i}T_{ik}G_{kj} \tag{8.2.46}$$

因此有

$$\Gamma_{ij}(E)=\frac{n_{-\sigma}}{E-T_0-I}\left\{\frac{\delta_{ij}}{2\pi}+\sum_{k\neq i}T_{ik}G_{kj}\right\} \tag{8.2.47}$$

以此式代入(8.2.34)式即得：

$$EG_{ij}(E)=T_0G_{ij}+\left\{1+\frac{In_{-\sigma}}{E-T_0-I}\right\}\left\{\frac{\delta_{ij}}{2\pi}+\sum_{k\neq i}T_{ik}G_{kj}\right\} \tag{8.2.48}$$

作傅里叶变换

$$G_{ij}(E)=N^{-1}\sum_{q}G(q,E)\exp[iq\cdot(R_i-R_j)] \tag{8.2.49}$$

并注意到 (8.2.3) 式，代入 (8.2.48) 式中，最后令等式两边 $N^{-1}\exp\{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{R}_i-\boldsymbol{R}_j)\}$的系数相等即得：

$$EG(\boldsymbol{q},E)=T_0G(\boldsymbol{q},E)+\left\{1+\frac{In_{-\sigma}}{E-T_0-I}\right\}\left\{\frac{1}{2\pi}+(\epsilon_q-T_0)G(\boldsymbol{q},E)\right\} \tag{8.2.50}$$

由此即得：

$$G^\sigma(\boldsymbol{q},E)=\frac{1}{2\pi}\frac{E-T_0-I(1-n_{-\sigma})}{(E-T_0-I)(E-\epsilon_q)+In_{-\sigma}(T_0-\epsilon_q)} \tag{8.2.51*}$$

(8.2.51)式即为考虑了关联问题的近似解. (上式左方中写出了表示自旋的指标 σ).

现在给出确定 n_σ(自旋为σ的每原子平均电子数)的方程. 根据(8.2.32)式可有：

$$\begin{aligned} n_\sigma &= \frac{1}{N}\sum_j\langle C_{j\sigma}^+C_{j\sigma}\rangle \\ &= \frac{\mathrm{i}}{N}\lim_{\epsilon\to0^+}\sum_j\int[G_{jj}(E+\mathrm{i}\epsilon)-G_{jj}(E-\mathrm{i}\epsilon)]\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{e}^{\beta(E-\mu)}+1} \end{aligned} \tag{8.2.52}$$

其中利用了定义式(8.2.28′). 很明显，(8.2.52)式的下列部分给出每原子的、自旋为σ的电子(赝粒子)态密度 $\rho_\sigma(E)$：

$$\rho_\sigma(E)=\frac{\mathrm{i}}{N}\lim_{\epsilon\to0^+}\sum_j[G_{jj}(E+\mathrm{i}\epsilon)-G_{jj}(E-\mathrm{i}\epsilon)] \tag{8.2.53}$$

注意上式右方 G_{jj} 实际有自旋指标($G_{jj,\sigma}$). 于是(8.2.52) 可写为

$$n_\sigma=\int\rho_\sigma(E)\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{e}^{\beta(E-\mu)}+1} \tag{8.2.54}$$

此式又可写为

---

* 若傅里叶展开式(8.2.49)右方多一因子$(2\pi)^{-1}$，则 (8.2.51) 式右方就没有$(2\pi)^{-1}$因子，读者在有些文献中会看到(8.2.51)式右方没有因子$(2\pi)^{-1}$.

$$\langle n\uparrow\rangle=\int\rho_{\uparrow}(E)\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{e}^{\beta(E-\mu)}+1} \tag{8.2.55}$$

$$\langle n\downarrow\rangle=\int\rho_{\downarrow}(E)\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{e}^{\beta(E-\mu)}+1} \tag{8.2.56}$$

此外应有

$$\langle n\uparrow\rangle+\langle n\downarrow\rangle=n \tag{8.2.57}$$

(8.2.55)—(8.2.57)就是确定$\langle n\uparrow\rangle$,$\langle n\downarrow\rangle$,$\mu$作为$n$的函数之方程. ρ由(8.2.53)式计算. 对于关联问题的近似解，可利用(8.2.51)形式的$G(\boldsymbol{q}, E)$计算态密度. 实际上，利用(8.2.49)式可将(8.2.53)式写为:

$$\rho_{\sigma}(E)=\frac{\mathrm{i}}{N}\lim_{\epsilon\to 0^{+}}\sum_{\boldsymbol{q}}[G(\boldsymbol{q},E+\mathrm{i}\epsilon)-G(\boldsymbol{q},E-\mathrm{i}\epsilon)] \tag{8.2.58}$$

如在Hartree-Fock近似中一样，(8.2.55)—(8.2.57)总具有非磁解

$$\langle n\downarrow\rangle=\langle n\uparrow\rangle=\frac{1}{2}n \tag{8.2.59}$$

为便于讨论，将(8.2.51)式写为如下形式:

$$G^{\sigma}(\boldsymbol{q},E)=\frac{1}{2\pi}\frac{1}{E_{q\sigma}^{(1)}-E_{q\sigma}^{(2)}}\left\{\frac{E_{q\sigma}^{(1)}-T_0-I(1-n_{-\sigma})}{E-E_{q\sigma}^{(1)}}-\frac{E_{q\sigma}^{(2)}-T_0-I(1-n_{-\sigma})}{E-E_{q\sigma}^{(2)}}\right\} \tag{8.2.60}$$

其中$E_{q\sigma}^{(1)}<E_{q\sigma}^{(2)}$，是(8.2.51)式右方分母的两个根，即它们满足:

$$(E-\epsilon_{q})(E-T_0-I)+In_{-\sigma}(T_0-\epsilon_{q})=0. \tag{8.2.61}$$

可以证明:

$$E_{q\sigma}^{(1)}<T_0+I(1-n_{-\sigma})<E_{q\sigma}^{(2)}.$$

所以(8.2.60)式具有形式

$$G^{\sigma}(\boldsymbol{q},E)=\frac{1}{2\pi}\left\{\frac{A_{q\sigma}^{(1)}}{E-E_{q\sigma}^{(1)}}+\frac{A_{q\sigma}^{(2)}}{E-E_{q\sigma}^{(2)}}\right\} \tag{8.2.60'}$$

其中 $A_{q\sigma}^{(1)}, A_{q\sigma}^{(2)}>0$. 如果可以有$A_{q\sigma}^{(1)}=A_{q\sigma}^{(2)}=1$的话，那么(8.2.60′)式是具有两带结构的格林函数，色散律分别为 $E=E_{q\sigma}^{(1)}$，$E=E_{q\sigma}^{(2)}$. 应该注意，在零带宽极限，$\epsilon_q=T_0$，所以(8.2.61)式给出的准粒子能量为 $E=T_0$ 及 T_0+I.

由(8.2.58)及(8.2.60)式经计算可得：

$$\begin{aligned}\rho_\sigma(E)&=|E-T_0-I(1-n_{-\sigma})|N^{-1}\sum_q\delta[(E-\epsilon_q)(E-T_0-I)\\&\quad+In_{-\sigma}(T_0-\epsilon_q)]\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\,|E-T_0-I(1-n_{-\sigma})|\delta[(E-t)(E-T_0-I)\\&\quad+In_{-\sigma}(T_0-t)]\times\frac{1}{N}\sum_q\delta[t-\epsilon_q]\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\,P(t)\delta\left[\frac{E(E-T_0-I)+In_{-\sigma}T_0}{E-T_0-I(1-n_{-\sigma})}-t\right]\\&=P\{g(E,n_{-\sigma})\}\end{aligned}\tag{8.2.62}$$

其中利用了关系式

$$\delta(ax)=\frac{\delta(x)}{|a|}\tag{8.2.63}$$

而

$$g(E,n_{-\sigma})=E-In_{-\sigma}-\frac{I^2n_{-\sigma}(1-n_{-\sigma})}{E-T_0-I(1-n_{-\sigma})}\tag{8.2.64}$$

函数 P 的定义为

$$P(E)=\frac{1}{N}\sum_q\delta(E-\epsilon_q)\tag{8.2.65}$$

它是和带能 ϵ_k 对应的态密度，而 $\rho_\sigma(E)$则是准粒子度密度. (8.2.62)式表明，$\rho_\sigma(E)$可由(8.2.62)及(8.2.64)，利用 $P(E)$变换得到.

四、铁磁性的条件

最后，在上节关联近似下讨论一下铁磁条件．仍以 $T=0\mathrm{K}$ 下的情况来讨论．此时，由(8.2.55)及(8.2.62)式可写出决定 n_σ 的式子：

$$n_\sigma=\int_{-\infty}^{\mu}P\{g(E,n_{-\sigma})\}\mathrm{d}E \tag{8.2.66}$$

与本节一中对 Hartree-Fock 近似下考虑的方法类似，我们讨论具有弱铁磁性的解之条件，即取：

$$\langle n\uparrow\rangle=\frac{1}{2}n+x$$

$$\langle n\downarrow\rangle=\frac{1}{2}n-x$$

与得到(8.2.18)及(8.2.19)式完全类似，对 $P\{g(E,\ n\uparrow)\}$ 及 $P\{g(E,n\downarrow)\}$ 在非磁解 $n\uparrow=n\downarrow=\frac{1}{2}$ 附近作 Taylor 级数展开，代入由(8.2.66)式所决定的 $\langle n\uparrow\rangle$ 及 $\langle n\downarrow\rangle$ 的式子，将所得两式相加及相减得到如下结果：

$$\frac{1}{2}n=\int_{-\infty}^{\mu}P\left\{g\left(E,\ \frac{1}{2}n\right)\right\}\mathrm{d}E \tag{8.2.67}$$

$$-\frac{1}{2}=\int_{-\infty}^{\mu}\frac{\partial}{\partial n}\left[P\left\{g\left(E,\frac{1}{2}n\right)\right\}\right]\mathrm{d}E \tag{8.2.68}$$

(8.2.67)式是非磁解下决定 μ 的式子，(8.2.68)式即是在计及关联效应时的铁磁条件．

不用一些特殊模型态密度很难对(8.2.68)式得出一些具体印象．Hubbard[2]讨论了两个模型态密度．我们略去他的具体计算而只给结论．第一个模型态密度是“方带”态密度

$$P(E)=\begin{cases}\dfrac{1}{\Delta}, & \text{若}\,T_0-\dfrac{1}{2}\Delta<E<T_0+\dfrac{1}{2}\Delta\\ 0, & \text{若在其它能量值}\end{cases} \tag{8.2.69}$$

在H-F近似下，由(8.2.20)式给出对这模型态密度的铁磁条件是：

$$I>\Delta \tag{8.2.70}$$

且与n无关. 而由计及关联后的(8.2.68)式经计算得出条件式：

$$\frac{\frac{1}{4}I}{\sqrt{\left(\frac{1}{2}I+\frac{1}{4}\Delta\right)^2-\frac{1}{4}nI\Delta}}>1 \tag{8.2.71}$$

上式是在假设μ在较低带内得到的，于是必须有$n<1$. 但是对于$n<1$，对任何I和Δ值，(8.2.71)式都不能被满足. 因此，虽然H-F理论在条件(8.2.70)下给出铁磁性，但近似的关联理论预言，对于模型态密度(8.2.69)式，铁磁性是不可能的. 这是可以理解的，因为本就可以预期，计及关联效应时的铁磁条件比单纯H-F理论结果会更苛刻；理由是：只有在铁磁态的自由能比非磁态为小时才能发生铁磁态，而当计入关联效应时，这里只把具有相反自旋电子之间的关联效应考虑了，而具有平行自旋的电子间，甚至在H-F近似中也由于Fermi-Dirac统计而已然彼此远离，因此，引入关联效应对非磁态能量的降低比对铁磁态降得多，这就使得产生铁磁态的条件更加严峻.

Hubbard提出的第二个模型态密度为：

$$P(E)=\begin{cases}\frac{1}{\delta}, & \text{若 } T_0-\frac{1}{2}\Delta<E<T_0-\frac{1}{2}\Delta+\frac{1}{2}\delta \\ & \text{和若} T_0+\frac{1}{2}\Delta-\frac{1}{2}\delta<E<T_0+\frac{1}{2}\Delta \\ 0, & \text{其它情况}\end{cases} \tag{8.2.72}$$

这代表宽为$\frac{1}{2}\delta$的双方带(*two square bands*)，它是模拟具有两个峰的态密度，这是铁磁材料的一般特征. 经过具体计算得到铁磁性条件为：

$$\delta<\frac{\frac{1}{4}\Delta I}{\sqrt{\left(\frac{1}{2}I+\frac{1}{4}\Delta\right)^{2}-\frac{1}{4}nI\Delta}} \tag{8.2.73}$$

只要 δ 足够小，这条件总能满足．从(8.2.73)式可以看出，仅在 δ 比 Δ 小些时(8.2.73)式才能满足．由此可以推测：费密能落在其态密度较之整个带的平均态密度较高的带区内，这是有利于铁磁的必需条件．

§ 8.3 金属中的局域化磁态——Anderson模型

当过渡金属中溶有铁原子(或钴、镍原子)而形成稀释合金时，实验表明，杂质局域磁矩的出现主要是随作为基质的过渡金属而变．图 8.3 表明了这一情况．由图可见，作为 d 电子浓度的函数，局域磁矩出现与否有明晰的区域界限．

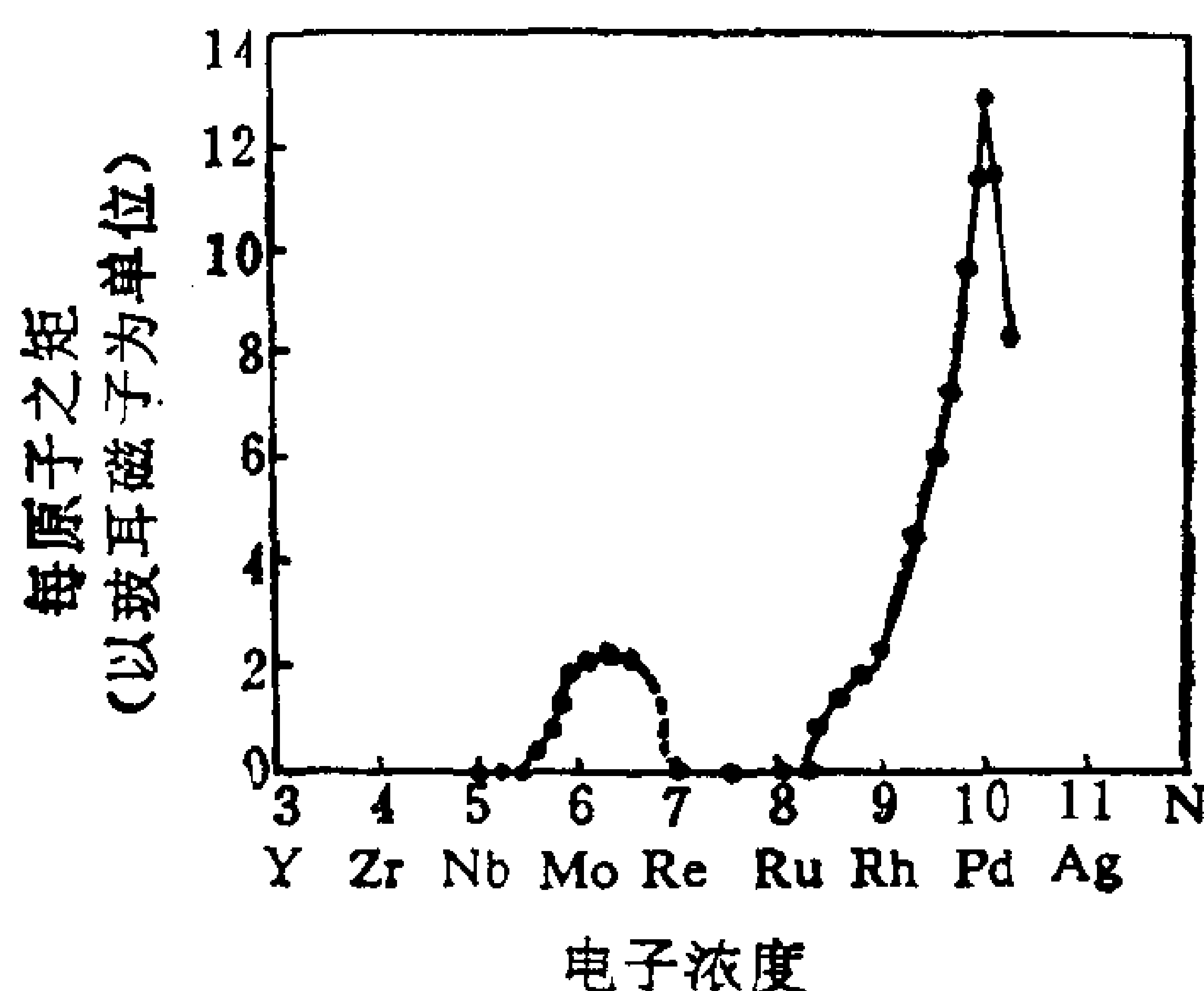


图 8.3 溶解于第二行过渡金属及合金中的铁原子磁矩随 d 电子浓度的变化

Anderson 1961 年从理论上研究了这一问题[6]．本节主要介绍 Anderson 哈密顿量及在 Hartree-Fock 近似下他的理论结果．本节采用文献[6]所用的符号．

一、Anderson哈密顿量

把Hubbard关联问题的关联项应用到稀释过渡金属合金问题上来，Anderson建议了一个局域(以后用d表示)态，在这态中的内壳层态电子的库仑关联积分是问题中的主要参量

$$U=\int|\phi_{\text{loc}}(r_1)|^2\frac{e^2}{r_{12}}|\phi_{\text{loc}}(r_2)|^2\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2 \tag{8.3.1}$$

Anderson把局域态的哈密顿量写为

$$H_{\mathrm{d}}=\sum_{\sigma}E_{\mathrm{d}}n_{\mathrm{d}\sigma}+Un_{\mathrm{d}\uparrow}n_{\mathrm{d}\downarrow} \tag{8.3.2}$$

其中

$$n_{\mathrm{d}\sigma}=C^{+}_{\mathrm{d}\sigma}C_{\mathrm{d}\sigma} \tag{8.3.3}$$

是占有数算符．另一方面必须考虑作为基体的导带，自然认为用通常能带结构图象中的单电子哈密顿量来描写它，对它略去库仑关联，于是：

$$H_{带}=\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\epsilon_{\boldsymbol{k}}n_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{8.3.4}$$

哈密顿量(8.3.2)和(8.3.4)式是从两个相反方向的近似去描写固体中的电子的．能带哈密顿量是一种单电子理论，在其近似中是把电子视为在所有原子的平均场中运动的．另一方面H_{d}是一种原子理论近似，它只考虑在一个原子上的电子，但计入了库仑关联．要描写局域磁矩需用第二种描写，而要描写电子退局域化则需用前者．描写稀释合金中的局域磁矩问题恰是由非局域化的电子态中建立局域磁性质．Anderson针对这一情形引入了导带态和局域态(d态)之间相互作用哈密顿量为：

$$H_{sd}=\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}V_{d\boldsymbol{k}}(C^{*}_{\boldsymbol{k}\sigma}C_{d\sigma}+C^{*}_{d\sigma}C_{\boldsymbol{k}\sigma}) \tag{8.3.5}$$

其中

$$
\begin{aligned}
V_{dk} &= \langle \phi_{\mathrm{loc}}(\boldsymbol{r}) | \mathscr{H}_{\mathrm{HF}} | \phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{R}_n} \exp(i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_n) \langle \phi_{\mathrm{loc}}(\boldsymbol{r}) | \mathscr{H}_{\mathrm{HF}} | W(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n) \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \phi_{\mathrm{loc}}(\boldsymbol{r}) \mathscr{H}_{\mathrm{HF}} \sum_{\boldsymbol{R}_n} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{R}_n) W(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n)
\end{aligned} \tag{8.3.6}
$$

其中 $W(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_n)$ 是导带的 Wannier 函数. V_{dk} 是混合矩阵元.由(8.3.5)式表示的 s-d 相互作用纯属单电子效应.

经过以上考虑, Anderson 提出他的著名哈密顿量:

$$
H = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \epsilon_k n_{\boldsymbol{k}\sigma} + \sum_{\sigma} E_d n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} V_{dk} (C^*_{\boldsymbol{k}\sigma} C_{d\sigma} + C^*_{d\sigma} C_{\boldsymbol{k}\sigma}) \tag{8.3.7}
$$

二、Hartree-Fock 近似

Anderson 哈密顿量有库仑关联项,严格地说应该用多体理论处理,当然Hartree-Fock 可作为最简单的近似. 为了能描写磁性质,Anderson 提出了不受约束 Hartree-Fock 理论(unrestricted H-F theory), 这理论中自旋向上和自旋向下的单电子 H-F 哈密顿量不同,以 H_σ 表示. 但是作为 H-F 近似,假设:

$$
U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \to U n_{d\uparrow} \langle n_{d\downarrow} \rangle + U \langle n_{d\uparrow} \rangle n_{d\downarrow} \tag{8.3.8}
$$

这是遵循 Hubbard 平均场近似(8.2.5)式而写下的.

于是,在 Hartree-Fock 近似下, Anderson 哈密顿量化为:

$$
H = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \epsilon_k n_{\boldsymbol{k}\sigma} + \sum_{\sigma} (E_d + U \langle n_{d,-\sigma} \rangle) n_{d\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} V_{kd} (C^*_{\boldsymbol{k}\sigma} C_{d\sigma} + C^*_{d\sigma} C_{\boldsymbol{k}\sigma}) \tag{8.3.9}
$$

Anderson 把使哈密顿对角化的新算符记为 $C^*_{n\sigma}$

$$C^*_{n\sigma}=\sum_{\boldsymbol{k}}\langle n\sigma|\boldsymbol{k}\sigma\rangle C^*_{\boldsymbol{k}\sigma}+\langle n\sigma|d\sigma\rangle C^*_{d\sigma} \tag{8.3.10}$$

其相应的能量本征值记为 $\epsilon_{n\sigma}$，采用格林函数方法处理问题，格林函数定义为：

$$(E+\mathrm{i}s-H)G(E+\mathrm{i}s)=1 \tag{8.3.11}$$

在 n 表象中 G 是对角的：

$$G^{\sigma}_{nn}(E+\mathrm{i}s)=\frac{1}{E+\mathrm{i}s-\epsilon_{n\sigma}} \tag{8.3.12}$$

但是对解决问题所需要的恰是在未受微扰态的表象中的格林函数．这要从(8.3.11)式去求解．(8.3.11)式可表示为：

$$\sum_{\gamma}(E+\mathrm{i}s-H)_{\mu\nu}G_{\nu\kappa}=\delta_{\mu\kappa} \tag{8.3.13}$$

每一下标(μ,ν,κ)可取 1,2，代表传导电子($\boldsymbol{k}$，σ)态与局域 d 态((d,σ))．

经计算 Anderson 得到：

$$\langle \mathrm{d}\sigma|G(E+\mathrm{i}s)|\mathrm{d}\sigma\rangle=$$

$$\frac{1}{E+\mathrm{i}s-E_d-U\langle n_{d,-\sigma}\rangle-\sum_{\boldsymbol{k}}|V_{d\boldsymbol{k}}|^2(E+\mathrm{i}s-\epsilon_{\boldsymbol{k}})^{-1}} \tag{8.3.14}$$

上式左方亦可简记为$G^{\sigma}_{dd}(E+\mathrm{i}s)$．在(8.3.14)式右方分母中的求和可写为

$$\sum_{\boldsymbol{k}}|V_{d\boldsymbol{k}}|^2\frac{1}{E+\mathrm{i}s-\epsilon_{\boldsymbol{k}}}=\mathrm{P}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{|V_{d\boldsymbol{k}}|^2}{E-\epsilon_{\boldsymbol{k}}}-\mathrm{i}\pi\sum_{\boldsymbol{k}}|V_{d\boldsymbol{k}}|^2\delta(E-\epsilon_{\boldsymbol{k}}) \tag{8.3.15}$$

其中 P 表示主值．从(8.3.14)及(8.3.15)式看出，(8.3.15)式右方第一项只引起 E_d 的能量移动，我们以下将略去它，因为简单地移动所设的未微扰的能量 E 就可计入它的效应．我们集中注意(8.3.15)式右方第二项，我们近似地将它写为：

$$-\mathrm{i}\pi\langle|V_{d\boldsymbol{k}}|^2\rangle_{\mathrm{av}}\sum_{\boldsymbol{k}}\delta(E-\epsilon_{\boldsymbol{k}})$$

$$= -\mathrm{i}\pi\langle|V_{dk}|^2\rangle_{\mathrm{av}}N(E) \tag{8.3.16}$$

其中$\langle\cdots\rangle_{\mathrm{av}}$ 表示取对$|\boldsymbol{k}\sigma\rangle$诸态的平均. 在写下 (8.3.16)式第二个等号时,我们利用了:

$$N(E)=\sum_{\boldsymbol{k}}\delta(E-\epsilon_{\boldsymbol{k}}) \tag{8.3.17}$$

$N(E)$是传导电子态密度. 以(8.3.16)代入(8.3.14)式即得:

$$\langle \mathrm{d}\sigma|G(E+\mathrm{i}s)|\mathrm{d}\sigma\rangle=\frac{1}{E+\mathrm{i}s-E_{d\sigma}+\mathrm{i}\Delta} \tag{8.3.18}$$

其中

$$E_{d\sigma}=E_d+U\langle n_{d,-\sigma}\rangle \tag{8.3.19}$$

$$\Delta=\pi\langle|V_{dk}|^2\rangle_{\mathrm{av}}N(E) \tag{8.3.20}$$

现在求局域态态密度 $N_{d\sigma}(E)$. 在上面解释 Anderson 哈密顿量的建立时应已了解:局域态$|d\sigma\rangle$与导带态混杂(*mixing*), 故可写:

$$\begin{aligned}
N_{d\sigma}(E)&=\sum_n|\langle n\sigma|\mathrm{d}\sigma\rangle|^2\delta(E-\epsilon_{n\sigma})\\
&=-\frac{1}{\pi}\sum_n\langle \mathrm{d}\sigma|n\sigma\rangle\mathrm{Im}\left\{\langle n\sigma|\frac{1}{E-H}|n\sigma\rangle\right\}\langle n\sigma|\mathrm{d}\sigma\rangle\\
&=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\{\langle \mathrm{d}\sigma|G(E)|\mathrm{d}\sigma\rangle\}
\end{aligned} \tag{8.3.21}$$

以(8.3.18)式代入(8.3.21)式即得:

$$N_{d\sigma}(E)=\frac{1}{\pi}\frac{1}{(E-E_{d\sigma})^2+\Delta^2} \tag{8.3.22}$$

即得到洛仑兹型态密度. 图 8-4 表示局域态能级及态密度情况. 在能量 $E+U\langle n_-\rangle$和 $E+U\langle n_+\rangle$处的隆起凸包就代表宽为 2Δ 的自旋向上和自旋向下的局域态能级.

三、决定$\langle n_{d\sigma}\rangle$

在 $T=0\mathrm{K}$, $n_{d\sigma}$ 的平均值$\langle n_{d\sigma}\rangle$由下式决定:

$$\langle n_{d\sigma}\rangle=\int_{-\infty}^{\epsilon_F}N_{d\sigma}(E)\mathrm{d}E \tag{8.3.23}$$

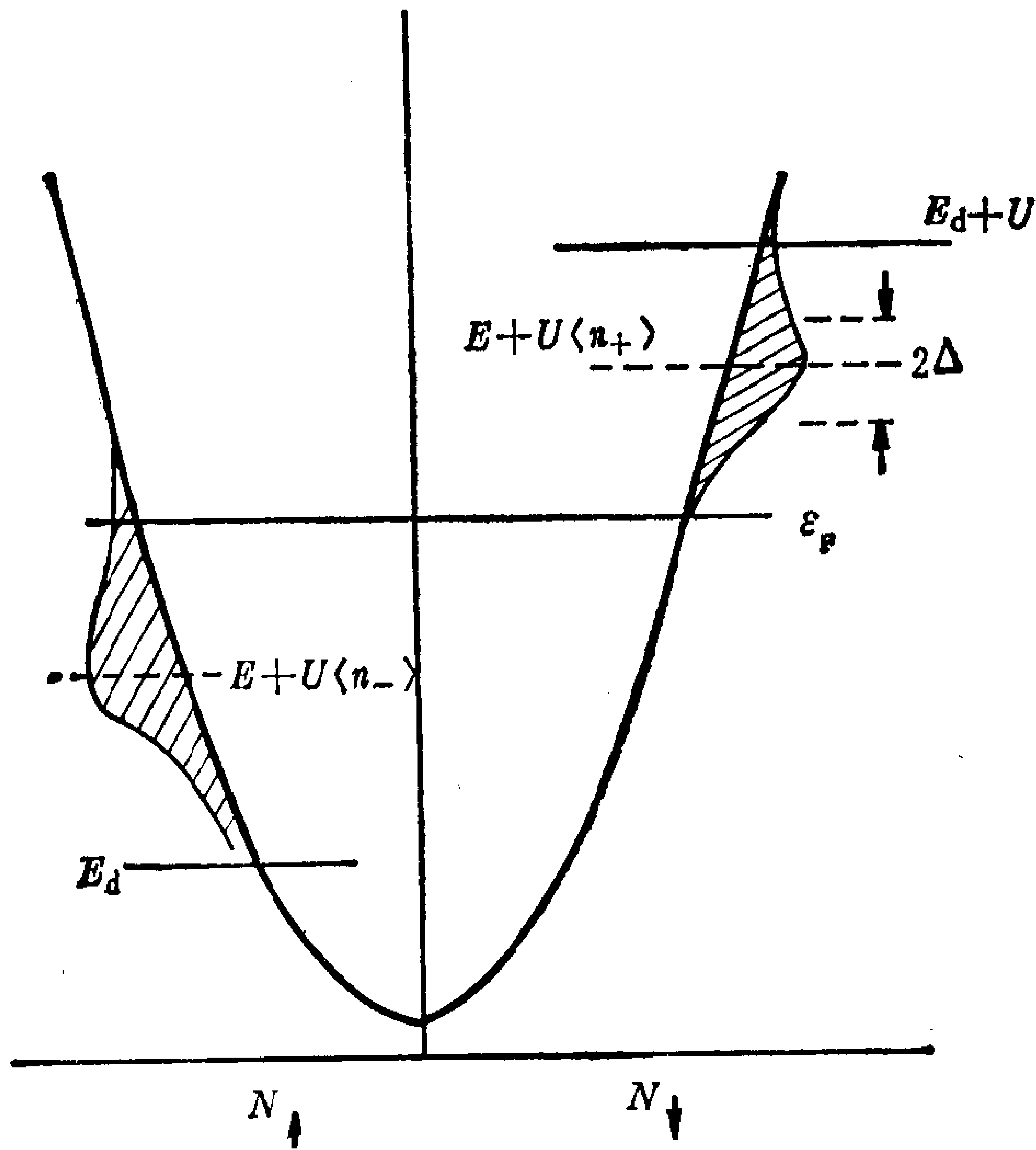


图 8.4 态密度

利用(8.3.19)，(8.3.22)及（8.3.23）式经计算即得如下的自洽方程

$$\langle n_{d+}\rangle=\frac{1}{\pi}\cot^{-1}\left(\frac{E_d-\epsilon_F+U\langle n_{d-}\rangle}{\Delta}\right) \qquad (8.3.24)$$

$$\langle n_{d-}\rangle=\frac{1}{\pi}\cot^{-1}\left(\frac{E_d-\varepsilon_F+U\langle n_{d+}\rangle}{\Delta}\right) \qquad (8.3.25)$$

这就是 Anderson 方法中的基本方程. $\langle n_{d+}\rangle=\langle n_{d-}\rangle$总是方程(8.3.24)与(8.3.25)的解，这对应于杂质原子的非磁态. 而

$$\langle n_{d+}\rangle\neq\langle n_{d-}\rangle \qquad (8.3.26)$$

则对应于杂质原子处于磁态，其磁矩或者向上或者向下，在前者情况下$\langle n_{d+}\rangle>\langle n_{d-}\rangle$，而在后者有$\langle n_{d+}\rangle<\langle n_{d-}\rangle$. 这表示是二重简

并解.

我们不打算讲求解(8.3.24)及 (8.3.25) 式的细节. 只是指出, Anderson 在具体计算后得到了如下的"相图"(图 8-5). 图中纵坐标

$$y=\frac{\epsilon_F-E_d}{U} \tag{8.3.27}$$

它表示局域态能级 E_d 与费密能之间的差(用 U 约化). 图中横坐标

$$x=\frac{\pi\Delta}{U} \tag{8.3.28}$$

它是局域态带宽的量度. 图中分开了磁态区和非磁态区, 分别与 $UN_{d\sigma}(\varepsilon_F)<1$ 和 $UN_{d\sigma}(\varepsilon_F)>1$ 相对应.

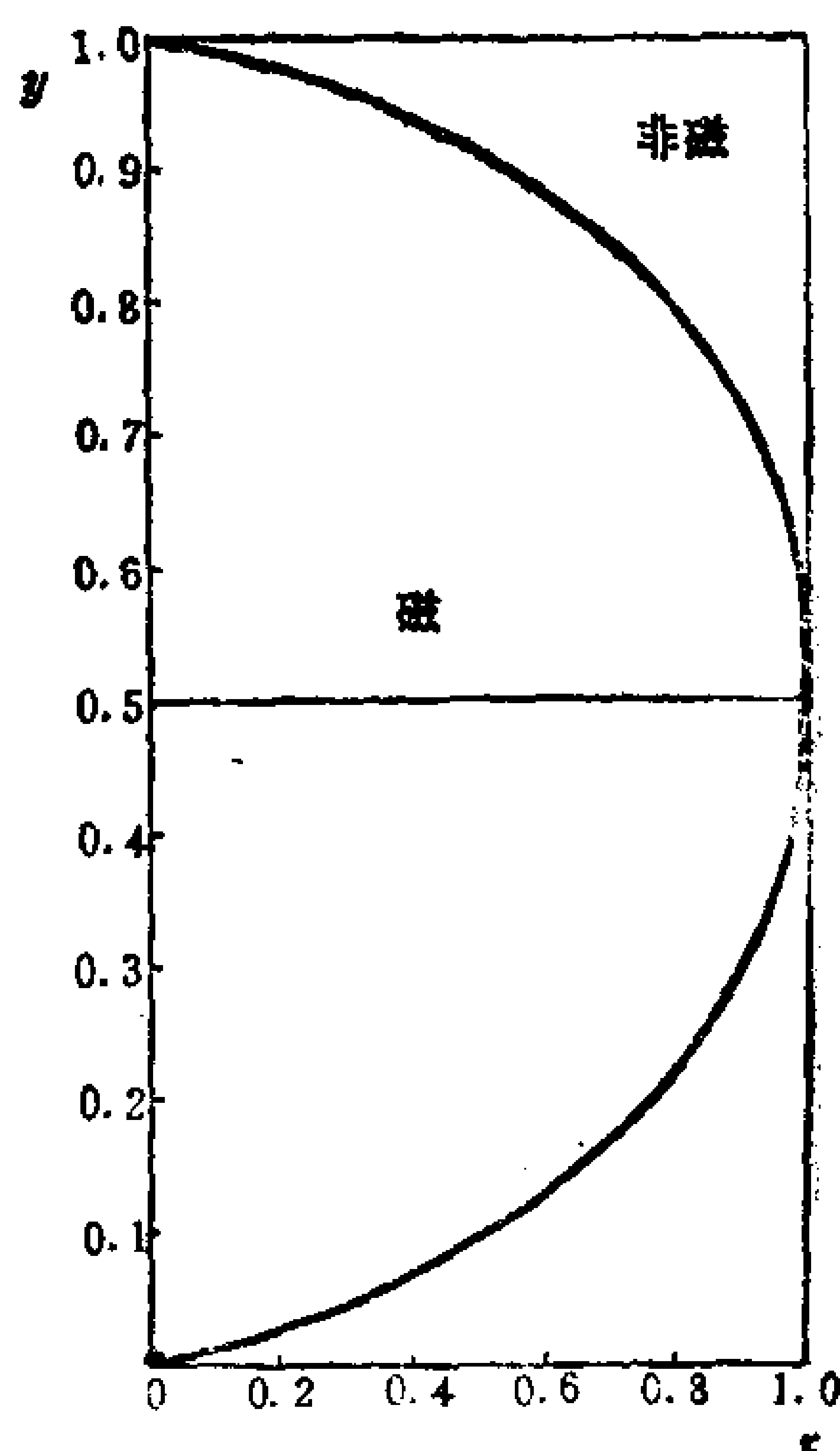


图 8.5 Anderson 模型下的磁区和非磁区

近年来, Anderson 哈密顿量已被许多人推广到 Anderson 周期模型, 即代替(8.3.7)式的杂质项.

$$\sum_{\sigma}E_d n_{d\sigma}+Un_{d\uparrow}n_{d\downarrow}+\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}V_{d\boldsymbol{k}}(C^*_{\boldsymbol{k}\sigma}C_{d\sigma}+C^*_{d\sigma}C_{\boldsymbol{k}\sigma}) \tag{8.3.29}$$

而改为周期格子:

$$\sum_{i,\sigma}E_d n_{i\sigma}+U\sum_{i}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$$

$$+\sum_{i,\boldsymbol{k},\sigma}\frac{V_{d\boldsymbol{k}}}{\sqrt{N}}\{\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i)C^*_{\boldsymbol{k}\sigma}C_{i\sigma}+\mathrm{h.c.}\} \tag{8.3.30}$$

读者可参考文献[7-11].

Anderson 曾提出负 U 中心概念作为非晶半导体的电子结构模型以解释非晶半导体材料的性质[12]. 在数学处理上即是把

(8.3.30)式中的U改为$-U(U>0)$，它表示在第i格位自旋向上与自旋向下的两电子之间有负关联能；有兴趣的读者可以参考文献[13-20].

附　录

现在证明(8.2.32)式.

一、时间关联函数定义

以$\mathscr{F}_{BA}(t,t')$及$\mathscr{F}_{AB}(t,t')$表示时间关联函数，定义为：

$$\mathscr{F}_{BA}(t,t')=\langle B(t')A(t)\rangle \tag{A-1}$$

$$\mathscr{F}_{AB}(t,t')=\langle A(t)B(t')\rangle \tag{A-2}$$

其中$\langle\cdots\rangle$代表巨正则系综平均. 在统计平衡时有：

$$\left.\begin{aligned}\mathscr{F}_{BA}(t,t')&=\mathscr{F}_{BA}(t-t')\\ \mathscr{F}_{AB}(t,t')&=\mathscr{F}_{AB}(t-t')\end{aligned}\right\} \tag{A-3}$$

与格林函数定义不同的是，(A-1)及(A-2)式中不含$\theta(t-t')$因子，因此当$t=t'$时仍为确定，这时有：

$$\left.\begin{aligned}\mathscr{F}_{BA}(0)&=\langle B(t)A(t)\rangle=\langle B(0)A(0)\rangle\\ \mathscr{F}_{AB}(0)&=\langle A(t)B(t)\rangle=\langle A(0)B(0)\rangle\end{aligned}\right\} \tag{A-4}$$

这正是统计力学中通常的关联分布函数.

二、证明

$$\langle A(t)B(t')\rangle=\langle B(t'-\mathrm{i}\beta)A(t)\rangle \tag{A-5}$$

利用求统计系综平均的定义及Tr运算下的转换关系即可证明，请读者自己证明.

三、设 $\mathscr{F}_{BA}(t-t')=\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\mathrm{d}\omega$ (A-6)

试证明 $\mathscr{F}_{AB}(t-t')=\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)\mathrm{e}^{\beta\omega}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\mathrm{d}\omega.$ (A-7)

证：利用关系式(A-5)有：

$$\langle A(t)B(t')\rangle=\langle B(t'-i\beta)A(t)\rangle$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega[t-t'+\mathrm{i}\beta]}\mathrm{d}\omega$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}J(\omega)\mathrm{e}^{\beta\omega}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\mathrm{d}\omega$$

四、设推迟格林函数 $G^{\mathrm{R}}(t-t')=\int_{-\infty}^{\infty}G^{\mathrm{R}}(E)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t')}\mathrm{d}E$

$$\tag{A-8}$$

其中

$$G^{\mathrm{R}}(E)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}G^{\mathrm{R}}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et}\mathrm{d}t \tag{A-9}$$

试证明

$$G^{\mathrm{R}}(E)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(\mathrm{e}^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\,\frac{\mathrm{d}\omega}{E-\omega+\mathrm{i}\epsilon},\ \epsilon\to0^{+} \tag{A-10}$$

其中 $\eta=\pm1$，正号表示玻色统计，负号为费密统计.

证：根据定义式(8.2.21)有

$$G^{\mathrm{R}}(E)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}E(t-t')}\theta(t-t')\{\langle A(t)B(t')\rangle-\eta\langle B(t')A(t)\rangle\}$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega J(\omega)(\mathrm{e}^{\beta\omega}-\eta)\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E-\omega)t}\theta(t)$$

其中利用了(A-6)及(A-7)式．依 θ 函数的积分表示：

$$\theta(t)=\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}xt}}{x+\mathrm{i}\epsilon}\mathrm{d}x \tag{A-11}$$

代入上式且完成对 t 及 x 的积分即得：

$$G^{\mathrm{R}}(E)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(\mathrm{e}^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\,\frac{\mathrm{d}\omega}{E-\omega+\mathrm{i}\epsilon}$$

同法可证

$$G^{\mathrm{A}}(E)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}(\mathrm{e}^{\beta\omega}-\eta)J(\omega)\,\frac{\mathrm{d}\omega}{E-\omega-\mathrm{i}\epsilon} \tag{A-12}$$

五、证明：

$$G(\omega+\mathrm{i}\epsilon)-G(\omega-\mathrm{i}\epsilon)=-\mathrm{i}(\mathrm{e}^{\beta\omega}-\eta)J(\omega) \qquad (A\text{-}13)$$

其中格林函数 G 由(8. 2. 28)式定义.

证：利用(A-10)及(A-12)式，由(8. 2. 28)式定义即得：

$$G(\omega+\mathrm{i}\epsilon)-G(\omega-\mathrm{i}\epsilon)$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E(\mathrm{e}^{\beta E}-\eta)J(E)\left\{\frac{1}{\omega-E+\mathrm{i}\epsilon}-\frac{1}{\omega-E-\mathrm{i}\epsilon}\right\}$$

利用关系式

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\left\{\frac{1}{x-\mathrm{i}\epsilon}-\frac{1}{x+\mathrm{i}\epsilon}\right\} \qquad (A\text{-}14)$$

即得(A-13)式. 由(A-13)式，利用推迟与超前格林函数求出 $J(\omega)$ 后，即可由(A-6)及(A-7)式求得时间关联函数.

六、证明(8. 2. 32)式.

由(A-13)式可有：

$$J(\omega)=\frac{G(\omega+\mathrm{i}\epsilon)-G(\omega-\mathrm{i}\epsilon)}{-\mathrm{i}(\mathrm{e}^{\beta\omega}-\eta)} \qquad (A\text{-}15)$$

以此代入(A-7)式，再利用(A-5)式即得(8. 2. 32)式.

参 考 文 献

[1] G. Rickayzen, *«Green's Functions and Condensed Matter»*. (Academic Press, London New York Toronto Sydney San Francisco, 1980) § 10.3

[2] *J. Hubbard, Proc. Roy., Soc. (London)* A **276** (1963) 238.

[3] E. C. Stoner, *Proc. Roy., Soc. (London)* A **165** (1938) 372.

[4] Д. Н. Зубарев, *УФН* **71** (1960) 71.

[5] J. Dorantes-Dávila *et al, Phys. Rev.*, B**27** (1983) 575.

[6] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **124** (1961) 41.

[7] W. Wiethege *et al, Z. Phys. B Condensed Matter* **47** (1982) 35.

[8] 陈长风, 章立源, *Chinese Phys. Lett.*, Vol **2** (1985) 177.

[9] 陈长风,章立源,*J. Phys. Chem. Solids*,**47**(1986)547.
[10] 赵光林,章立源,陈长风,*Physica* **144** B(1987)391.
[11] 章立源,*Commun. in Theor. Phys.* **9**(1988)307.
[12] P. W. Anderson,*Phys. Rev., Lett*,**34**(1975)953.
[13] 章立源,物理学报,**32**(1983)1435.
[14] 汤蕙,章立源,物理学报,**34**(1985)97.
[15] 章立源,*Solid State Commun*,**62**(1987)491.
[16] 章立源,姚承远,*Physica*,C153—**155**(1988)1207.
[17] 余亚斌,章立源,陈长风,*Physica*,C**156**(1988)566.
[18] 陈长风,章立源,*Physica*,**147** B(1987)175.
[19] 章立源,*Solid State Commun.*,**70**(1989)1065.
[20] 章立源 *Commun. Theor. Phys.* **12**(1989)27

第九章　固体的光学性质

光通过固体时，由于与固体中的电子、激子、晶格振动及杂质和缺陷等的相互作用而产生光的吸收.固体吸收外界能量后，其中部分能量以可见光或近于可见光的电磁波形式发射出来. 研究固体中光的吸收和发射可直接获得固体中的电子态、能带结构及各种激发态的知识. 本章介绍用格林函数计算简单金属光学性质的方法.

§9.1　基本光学常数

电磁波在固体中的传播由经典的 Maxwell 方程描述:

$$\begin{aligned} \nabla\times\boldsymbol{H}&=\frac{\varepsilon}{c}\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}+\frac{4\pi\sigma}{c}\boldsymbol{E} \\ \nabla\times\boldsymbol{E}&=-\frac{\mu}{c}\frac{\partial\boldsymbol{H}}{\partial t} \\ \nabla\cdot\boldsymbol{E}&=0 \\ \nabla\cdot\boldsymbol{H}&=0 \end{aligned} \tag{9.1.1}$$

ε 是介电常数，μ 是磁化率. 本章不考虑磁效应，取 $\mu=1$. (9.1.1)式中消去磁场后得到电场的方程如下,

$$\nabla^2\boldsymbol{E}=\frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{E}}{\partial t^2}+\frac{4\pi\sigma}{c^2}\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} \tag{9.1.2}$$

这个方程代表的波传播时有耗散. 若选频率为 ω，将 $\boldsymbol{E}$ 的解写为

$$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \tag{9.1.3}$$

则波方程要求

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{q}|^2&=\varepsilon\frac{\omega^2}{c^2}+\mathrm{i}\frac{4\pi\sigma\omega}{c^2} \\ q&=\frac{\omega}{c}\left(\varepsilon+\mathrm{i}\frac{4\pi\sigma}{\omega}\right)^{1/2} \end{aligned} \tag{9.1.4}$$

$q=|\boldsymbol{q}|$，传播常数 q 变为复数．波在自由空间传播时

$$q=\frac{\omega}{c}$$

波传播的速度是光速 c．引入复数折射率 N

$$N=\left(\varepsilon+\mathrm{i}\frac{4\pi\sigma}{\omega}\right)^{1/2} \tag{9.1.5}$$

则介质中电磁波的传播速度为

$$v=\frac{c}{N} \tag{9.1.6}$$

固体的光学性质可以用 N 表示．假定波的传播方向是 z 方向．将 N 写为

$$N=n+\mathrm{i}k \tag{9.1.7}$$

则 q 变为

$$q=\frac{n\omega}{c}+\mathrm{i}\frac{k\omega}{c} \tag{9.1.8}$$

(9.1.3)式可写为

$$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_0\exp\left[\mathrm{i}\omega\left(\frac{nz}{c}-t\right)\right]\exp\left(-\frac{k\omega z}{c}\right) \tag{9.1.9}$$

波传播的速度是 c/n．由于有第二个因子，波传播时受到阻尼．

在光学性质的研究中，经常研究光在固体表面的反射，这是一个很复杂的问题．为简单起见，我们只考虑垂直入射的情况．在

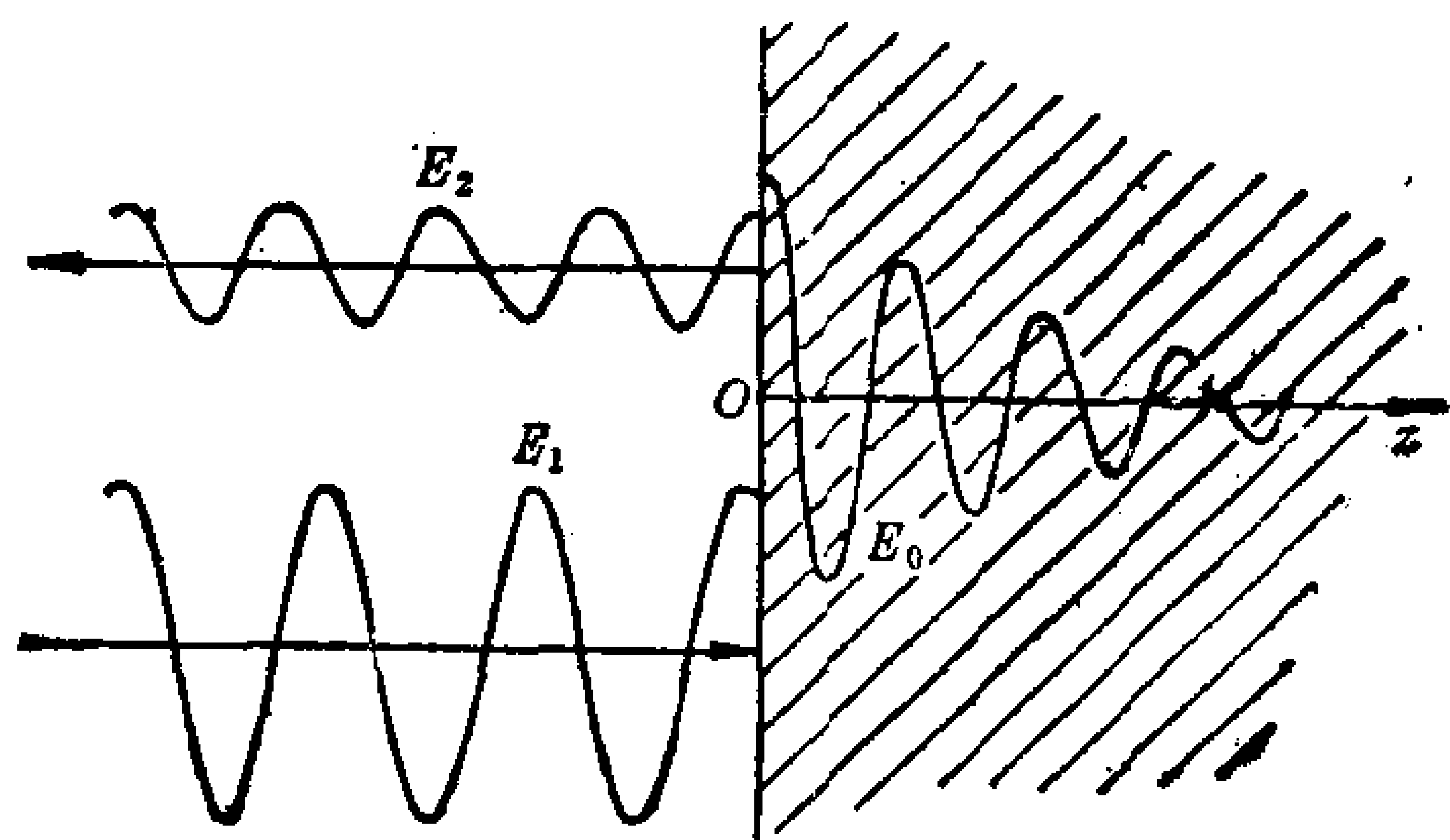


图 9.1

介质中光传播的方程是(9.1.9)式. 对 $z>0$,我们有

$$E_x=E_0\exp\left[\mathrm{i}\omega\left(\frac{Nz}{c}-t\right)\right] \tag{9.1.10}$$

对 $z<0$,即在自由空间

$$E_x=E_1\exp\left[\mathrm{i}\omega\left(\frac{z}{c}-t\right)\right]+E_2\exp\left[-\mathrm{i}\omega\left(\frac{z}{c}+t\right)\right] \tag{9.1.11}$$

分别相应于入射波和反射波. 利用 $z=0$ 处的边界条件可以得到

$$E_0=E_1+E_2 \tag{9.1.12}$$

上述电磁波也有磁场分量. 根据 Maxwell 方程写出 H_y 的方程,并利用 $z=0$ 处的边界条件可以得到

$$-NE_0=E_1-E_2 \tag{9.1.13}$$

由(9.1.12)和(9.1.13)式得到反射波与入射波振幅之比为

$$\frac{E_2}{E_1}=\frac{1-N}{1+N} \tag{9.1.14}$$

由此得到实的反射系数为

$$R=\left|\frac{1-N}{1+N}\right|^2=\frac{(n-1)^2+k^2}{(n+1)^2+k^2} \tag{9.1.15}$$

(9.1.9)式最后一个因子是衰减因子. 光的强度 I 正比于光电场的平方,所以光的强度在固体中按以下的形式衰减

$$I(z)=I(0)\mathrm{e}^{-\alpha z} \tag{9.1.16}$$

α 称为吸收系数, 与(9.1.9)式比较得到

$$\alpha=\frac{2k\omega}{c} \tag{9.1.17}$$

由此可见, 独立测量反射系数和吸收系数就可以完全确定 n 和 k. 实际测量比较复杂,光可能与表面有一角度,如使用薄膜则可能有光的穿透等等.

若引入复数介电常数

$$\varepsilon_c=\varepsilon_1+\mathrm{i}\varepsilon_2=\varepsilon+\mathrm{i}\frac{4\pi\sigma}{\omega} \tag{9.1.18}$$

则可求出

$$\begin{aligned}\varepsilon_1&=n^2-k^2\\ \varepsilon_2&=2nk\end{aligned} \tag{9.1.19}$$

以及

$$n=\sqrt{\frac{1}{2}\left[\varepsilon_1+\sqrt{\varepsilon_1^2+\left(\frac{4\pi\sigma_1}{\omega}\right)^2}\right]} \tag{9.1.20}$$

$$k=\sqrt{\frac{1}{2}\left[-\varepsilon_1+\sqrt{\varepsilon_1^2+\left(\frac{4\pi\sigma_1}{\omega}\right)^2}\right]} \tag{9.1.21}$$

其中 σ_1 是光电导 σ 的实数部分．因为 α 与 k 成正比，所以 $\sigma_1=0$ 时不发生光吸收．σ_1 很小时光的吸收也很弱．$\varepsilon_1>0$ 时 k 很小，介质是透明的；$\varepsilon_1<0$ 时 n 很小，由(9.1.15)可知介质表面有强的反射．$\varepsilon_1=0$ 是电磁波由反射到透射的转变．本章主要讨论 σ_1的计算．

光吸收有一个经典的 Drude 理论．它未考虑带间跃迁，但在一定频率区间是正确的．考虑外场中的近自由电子系统．将 Boltzmann 方程线性化并用弛豫时间近似则有

$$\frac{\partial f_1}{\partial t}-e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}+\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial f_1}{\partial\boldsymbol{r}}=-\frac{f_1}{\tau} \tag{9.1.22}$$

其中 f_1 是对平衡态分布函数 f_0 的一级修正．电场的波长一般很大，因而可以略去空间变化．假定 f_1 与时间的关系与电场相同，即也与 $e^{i\omega t}$ 成正比，则有

$$i\omega f_1-e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}=-\frac{f_1}{\tau} \tag{9.1.23}$$

用§6-1 中的方法可以求出电导

$$\sigma(\omega)=\frac{\sigma_0}{1+i\omega\tau} \tag{9.1.24}$$

σ_0 是直流电导．(9.1.24)式称为 Drude 公式．$\sigma(\omega)$的实数部分 σ_1 和虚数部分 σ_2 分别是

$$\sigma_1=\frac{\sigma_0}{1+\omega^2\tau^2},\qquad \sigma_2=\frac{-\omega\tau\sigma_0}{1+\omega^2\tau^2}\tag{9.1.25}$$

由直流电导的讨论可知，弛豫时间的倒数正比于散射几率．完全自由电子系统没有任何不均匀性，相应于$1/\tau\to0$．或$\mathrm{Re}[\sigma(\omega)]\propto\delta(\omega)$．因此完全自由电子系统并不吸收光，只有存在某种非均匀性时才会有光的吸收．若$\frac{1}{\tau}$很小而$\omega\tau\gg1$，可将(9.1.25)式第一式展开

$$\mathrm{Re}\sigma(\omega)=\frac{n_0e^2}{m\omega^2}\frac{1}{\tau}\left[1+O\left(\frac{1}{\omega^2\tau^2}\right)\right]\tag{9.1.26}$$

这样，在高频，电导的实数部分与$1/\tau$成正比，因而比较小，这就是所谓弱散射极限．下面将要介绍的力-力相关函数方法的结果也是应用于高频情况的．

§ 9.2 力-力相关函数

本节讨论用格林函数计算σ的方法．仍可应用第6章中得到的公式

$$\sigma(\omega)=\frac{\mathrm{i}n_0e^2}{m\omega}+\frac{\mathrm{i}\Pi(\omega)}{\omega}\tag{9.2.1}$$

$$\mathrm{Re}\sigma=-\mathrm{Im}\left[\frac{\Pi(\omega)}{\omega}\right]\tag{9.2.2}$$

$\pi(\omega)$是电流-电流相关函数$\Pi(\mathrm{i}\omega)$的推迟函数，$\Pi(\mathrm{i}\omega)$的定义是

$$\Pi(\mathrm{i}\omega)=-\frac{1}{V}\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\langle T_\tau\hat{J}_\mu(\tau)\hat{J}_\mu(0)\rangle\tag{9.2.3}$$

μ是(x,y,z)中的任何一个，其中重复的μ不表示求和．因为光波矢重k非常小，下面只讨论$k\to0$时的相关函数．假定系统是各向同性的，则$\langle T_\tau\hat{J}_x(\tau)\hat{J}_x(0)\rangle$可写为$\frac{1}{3}\langle T_\tau\hat{\boldsymbol{J}}(\tau)\cdot\hat{\boldsymbol{J}}(0)\rangle$．

力-力相关函数的严格推导是Mahan等人给出的．从$\Pi(\mathrm{i}\omega)$

的公式(9.2.3)式出发，利用公式

$$\int u\mathrm{d}v = uv - \int v\mathrm{d}u$$

令

$$u = J(\tau), \qquad v = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}}{\mathrm{i}\omega}$$

可以得到

$$\begin{aligned}\Pi(\mathrm{i}\omega) = & -\frac{1}{\mathrm{i}\omega V}[\langle \hat{J}_\mu(\beta)\hat{J}_\mu(0) - \hat{J}_\mu(0)J_\mu(0)\rangle] \\ & + \frac{1}{\mathrm{i}\omega V}\int_0^\beta d\tau e^{\mathrm{i}\omega\tau}\left\langle T_\tau\left[\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{J}_\mu(\tau)\right]\hat{J}_\mu(0)\right\rangle\end{aligned} \tag{9.2.4}$$

第一项是积分常数可以写为

$$\begin{aligned}\langle A(\beta)B(0) - A(0)B(0)\rangle &= \mathrm{Tr}(A\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}B - \mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}AB) \\ &= \mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}(BA - AB)] = -\mathrm{Tr}\langle[A, B]\rangle\end{aligned}$$

因为 $\hat{J}_\mu(0)$与自己的对易等于零，所以(9.2.4)式第一项等于零.用分部积分对(9.2.4)式第二项继续作变换. 因为相关函数只依赖于两个算符虚宗量的差，因此也可写为

$$\left\langle T_\tau\frac{\partial\hat{J}_\mu(\tau')}{\partial\tau'}\bigg|_{\tau'=0}\hat{J}_\mu(-\tau)\right\rangle$$

再用分部积分就可得到

$$\begin{aligned}\Pi(i\omega) = & \frac{1}{(\mathrm{i}\omega)^2V}\left\langle\left[\hat{J}_\mu(0), \left[\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{J}_\mu(\tau)\right]_{\tau=0}\right]\right\rangle \\ & + \frac{1}{(\mathrm{i}\omega)^2V}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\left\langle T_\tau\left[\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{J}_\mu(\tau)\right]\left[\frac{\partial}{\partial\tau'}\hat{J}_\mu(\tau')\right]_{\tau'=0}\right\rangle\end{aligned} \tag{9.2.5}$$

第一项包含 $\hat{J}_\mu$ 和 $\partial\hat{J}_\mu/\partial\tau$ 的对易，结果是一个实的常数，对电导的实数部分即光的吸收并无贡献，但对光学质量的重整化有供献，因此下面的推导仍保留这一项. 另一项是 $\partial\hat{J}_\mu/\partial\tau$ 的相关函数.

系统的哈密顿量可以写为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{9.2.6}$$

$\hat{H}_0$ 是均匀电子气的哈密顿量. $\hat{V}$ 是电子-电子相互作用以外其它的势，包括晶格的势 $V_{\bar{G}}$，$\bar{G}$ 是倒易点阵矢量，以及电子与杂质等的相互作用.

$$\hat{H}_0=\sum_{p\sigma}\varepsilon_p^0 C_{p\sigma}^+ C_{p\sigma}+\frac{1}{2V}\sum_{\substack{k,k',q\\ \sigma,\sigma'}} V(q) C_{k+q\sigma}^+ C_{k'-q\sigma'}^+ C_{k'\sigma'} C_{k\sigma} \tag{9.2.7}$$

$$\hat{V}=\sum_q \hat{\rho}(q)\Phi(q) \tag{9.2.8}$$

$$\Phi(q)=\delta_{q,G}V_G+\frac{V_i(q)}{V}\rho_i(q)+\sum_\lambda \frac{g_{q\lambda}}{V^{1/2}}(a_{q\lambda}+a_{-q\lambda}) \tag{9.2.9}$$

$\rho_i(q)$是杂质密度算符，$V_i(q)$是杂质势. 电流算符的时间导数是

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{J}_\mu&=[\hat{H},\hat{J}_\mu]=[V,\hat{J}_\mu]\\&=-\frac{e}{m}\sum_q q_\mu\hat{\rho}(q)\Phi(q)\end{aligned} \tag{9.2.10}$$

因为

$$\begin{aligned}[\hat{J}_\mu,\rho(q)]&=\frac{e}{m}\sum_{k,k',\sigma,\sigma'} k_\mu[C_{k\sigma}^+C_{k\sigma},C_{k'+q,\sigma'}^+C_{k'\sigma'}]\\&=\frac{e}{m}\sum_{k\sigma}C_{k+q\sigma}^+C_{k\sigma}[(k_\mu+q_\mu)-k_\mu]\\&=\frac{e}{m}q_\mu\rho(q)\end{aligned} \tag{9.2.11}$$

这正是牛顿定律，动量的时间导数等于力. 而力是势的梯度，

$$F_\mu(r)=-\nabla_\mu V(r)=-\mathrm{i}\sum_q V_q q_\mu \mathrm{e}^{\mathrm{i}q\cdot r}$$

(9.2.5)式中的常数项是

$$\left[\hat{J}_\mu, \frac{\partial \hat{J}_\mu}{\partial \tau}\right] = -\frac{e}{m}\sum_q q_\mu \Phi(q)[\hat{J}_\mu, \hat{\rho}(q)]$$

$$= -\frac{e^2}{m^2}\sum_q q_\mu^2 \hat{\rho}(q)\Phi(q) \tag{9.2.12}$$

这样，$\Pi(\mathrm{i}\omega)$ 可以写为

$$\Pi(\mathrm{i}\omega) = \frac{e^2}{m^2(\mathrm{i}\omega)^2 V}\Big[-\sum_q q_\mu^2\langle\hat{\rho}(q)\Phi(q)\rangle$$

$$+\sum_{q,q'} q_\mu q'_\mu \int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\langle T_\tau \hat{\rho}(q,\tau)\Phi(q,\tau)\hat{\rho}(q',0)\Phi(q',0)\rangle\Big] \tag{9.2.13}$$

广义势(9.2.9)式中只有声子部分依赖于 τ. (9.2.13)式第二项称为力-力相关函数，通常只计算到 Φ^2 项. (9.2.13)第二项已与 Φ^2 成正比，故可略去(9.2.6)式中的 $\hat{V}$ 对其平均值的影响. 第一项还需计算到 Φ^2 项.

$$\langle\hat{\rho}(q)\Phi(q)\rangle = \mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}_0}S(\beta)\hat{\rho}(q)\Phi(q)]$$

$$= \mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}_0}\hat{\rho}(q)\Phi(q)]$$

$$-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\langle T_\tau V(\tau)\hat{\rho}(q)\Phi(q)\rangle + \cdots$$

右方第一项等于 $n_0\Phi(0)V$，可取为能量原点，即取其等于零. 这样我们得到

$$\Pi(\mathrm{i}\omega) = \frac{-e^2}{m^2(\mathrm{i}\omega)^2 V}\sum_q q_\mu^2 \int_0^\beta \mathrm{d}\tau(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}-1)\langle T_\tau[\hat{\rho}(q,\tau)\hat{\rho}(-q,0)]\rangle$$

$$\times\langle\Phi(q,\tau)\Phi(-q,0)\rangle \tag{9.2.14}$$

下面几节将对不同形式的势进行计算，现在只作简单的说明. 假定 Φ 不依赖于 τ，如电子-杂质相互作用，则有

$$\langle\Phi(q)\Phi(q')\rangle = \frac{1}{V^2}V_i(q)V_i(q')\langle\rho_i(q)\rho_i(q')\rangle$$

$$= \frac{n_i}{V}V_i(q)^2\delta_{q+q',0} \tag{9.2.15}$$

$V_i(\boldsymbol{q})$是电子和杂质间未屏蔽的势. (9.2.14)式积分号下剩下的因子是

$$-\frac{1}{V}\int_0^\beta d\tau e^{i\omega\tau}\langle T_\tau \rho(\boldsymbol{q},\tau)\rho(-\boldsymbol{q},0)\rangle$$
$$=\frac{q^2}{4\pi e^2}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},i\omega)}-1\right] \tag{9.2.16}$$

其中$\varepsilon(\boldsymbol{q},i\omega)$是电子气理论中的介电常数($T>0$). 因为电荷之间的势是纵的势场, 因而$\varepsilon(\boldsymbol{q},i\omega)$称为纵介电常数. §9-1中引入的介电常数是电子气与横电磁场相互作用时引入的, 称为横介电常数,二者是不同的. 由此得到

$$\Pi_i(i\omega)=\frac{n_i}{4\pi m^2(i\omega)^2V}\sum_{\boldsymbol{q}}q_\mu^2 V_i(\boldsymbol{q})^2 q^2\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},i\omega)}-\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q})}\right] \tag{9.2.17}$$

角标i表示是杂质对$\Pi(i\omega)$的贡献. 因此, 电流-电流相关函数可表示为$\varepsilon^{-1}(\boldsymbol{q},i\omega)$与$\varepsilon^{-1}(\boldsymbol{q},0)$之差. 因为$\varepsilon(\boldsymbol{q},i\omega)$是$i\omega$的偶函数, $i\omega\to 0$时我们有$\varepsilon(\boldsymbol{q},i\omega)\to\varepsilon(\boldsymbol{q})+O(\omega^2)$. 因此$i\omega\to 0$时$\Pi_i(i\omega)$并不发散. 令$i\omega\to\omega+i\delta$

$$\Pi_i^R(\omega)=\frac{n_i}{4\pi m^2\omega^2V}\sum_{\boldsymbol{q}}q^2q_\mu^2V_i(\boldsymbol{q})^2\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)}-\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q})}\right] \tag{9.2.18}$$

及

$$\mathrm{Re}[\sigma_i(\omega)]=-\frac{n_i}{4\pi m^2\omega^2}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}q^2q_\mu^2V_i(\boldsymbol{q})^2\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right]+O(V_i^3) \tag{9.2.19}$$

即电导的实数部分与纵介电常数倒数的虚数部分成正比. $\mathrm{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$是电子气中产生激发的几率, (9.2.19)式表明, 光的吸收是由于在电子气中产生了激发. (9.2.19)式的优点是将复杂的电子-电子相互作用以介电常数表示, 因而可用电子气中已经讨论过的模型进行计算.

§9.3 带间跃迁

晶格中电子处于 Bloch 态. 电子从价带到导带的跃迁称为带间跃迁. 在光学频段, 光子的动量 $\boldsymbol{k}$ 与倒格矢相比是很小的, 在跃迁中可以忽略光子的波矢而假定所有的跃迁都是"垂直"的如图 9-2 所示.

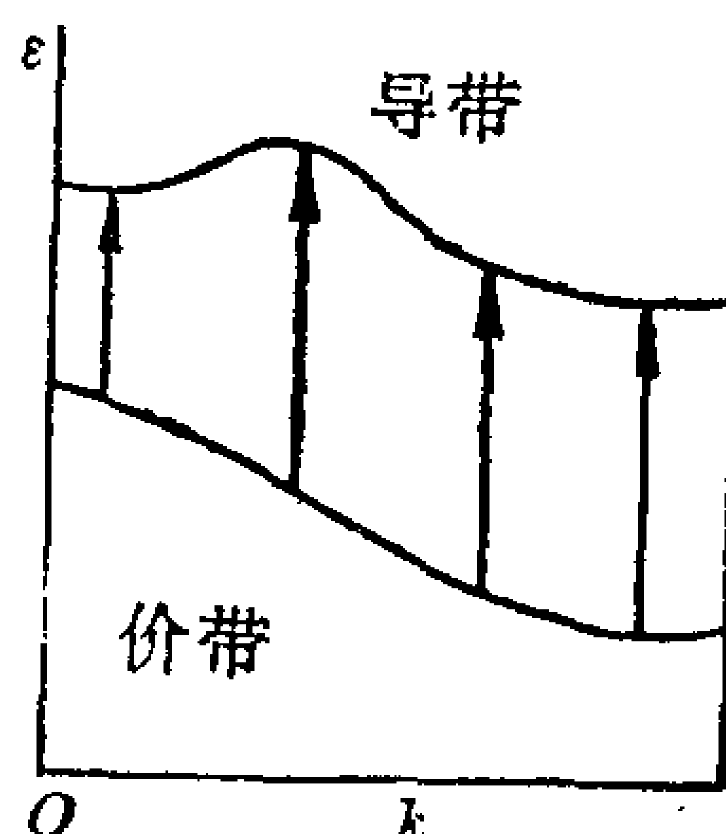


图 9.2

用力-力相关函数可以计算金属中由带间跃迁引起的光吸收率. 在理想晶格中离子势场是周期性的, 是(9.2.9)中的第一项

$$\Phi(\boldsymbol{q})=\sum_{\boldsymbol{G}}V_{G}\delta_{\boldsymbol{G},\boldsymbol{q}} \tag{9.3.1}$$

这个势是固定的, 不相关联, $\langle\Phi(\boldsymbol{q})\Phi(\boldsymbol{q}')\rangle=\langle\Phi(\boldsymbol{q})\rangle\langle\Phi(\boldsymbol{q}')\rangle$. (9.2.14)式中另一个相关函数 $\langle\rho(\boldsymbol{q},\tau)\,\rho(\boldsymbol{q}',0)\rangle$ 只有当 $\boldsymbol{q}'=-\boldsymbol{q}$ 时才不等于零. 相关函数

$$\langle\Phi(\boldsymbol{q})\Phi(-\boldsymbol{q})\rangle=\sum_{\boldsymbol{G}}V_{G}V_{-G}\delta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{G}}=\sum_{\boldsymbol{G}}V_{G}^{2}\delta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{G}} \tag{9.3.2}$$

$\Phi(\boldsymbol{q})$ 是一个静势, 势的相关函数是常数. 这与(9.2.15)式所表示的杂质散射的情况很相似. 将 (9.2.19) 式中的 $n_iV_i(\boldsymbol{q})^2$ 变为 $V_G^2\delta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{G}}$ 就可得到带间跃迁的结果

$$\mathrm{Re}[\sigma_I(\omega)]=\frac{-1}{4\pi m^2\omega^3}\sum_{\boldsymbol{G}}V_G^2G^2G_\mu^2\,\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{G},\omega)}\right]+O(V_G^3) \tag{9.3.3}$$

角标 I 表示带间跃迁. 注意到

$$-\mathrm{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)=\frac{\varepsilon_2}{|\varepsilon|^2} \tag{9.3.4}$$

$1/|\varepsilon|^2$ 与 V_G^2 一起给出屏蔽的电子-离子相互作用. 如果对 ε_2 用

RPA 近似，则 $G > 2k_F$ 时有

$$\varepsilon_2(\boldsymbol{G},\omega)=\frac{e^2m}{G^3}\left[k_F^2-\left(\frac{m}{G}\right)^2(\omega-\varepsilon_G)^2\right] \tag{9.3.5}$$

由此得到

$$\mathrm{Re}[\sigma_I(\omega)]=\frac{e^2}{4\pi m\omega^3}\sum_G\frac{G_\mu^2}{G}\left|\frac{V_G}{\varepsilon(\boldsymbol{G},\omega)}\right|^2$$

$$\times\left[k_F^2-\left(\frac{m}{G}\right)(\omega-\varepsilon_G)^2\right]+O\,(V_G^3) \tag{9.3.6}$$

这个公式与描写金属中带间跃迁的 Milson-Butcher 公式是相同的.

图 9-3 表示碱金属中(110)方向的带结构. 费密能级用虚线表示. 图中标明了带间跃迁. 在波矢空间中跃迁是垂直的. 因为光的波矢非常小，不会使波矢发生水平方向的变化. 这个跃迁是用约化能带表示的. 在扩展带结构中光跃迁使电子的波矢改变倒格矢 $\boldsymbol{G}$. 光吸收中电子由光波得到能量，由晶格得到动量.

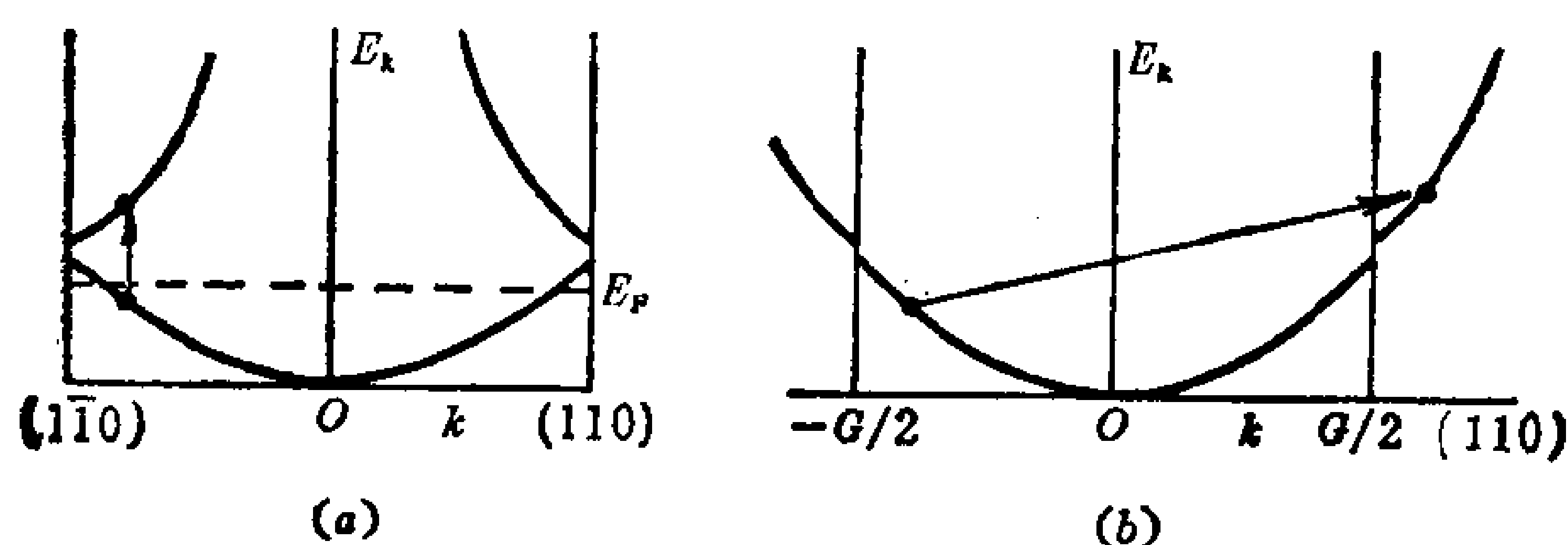


图 9.3 碱金属中的带间跃迁
(a) 约化能带 (b) 扩展能带

碱金属的光吸收如图 9-4 所示. 低频部分是 Drude公式的贡献，可以用(9.1.25)式描写. 图9-4 中的带间跃迁从$\omega\approx 2$eV的地方开始. 因为费密面并未与布里渊区的界面接触，$k_F<\frac{1}{2}G$. 所以(9.3.5)式是不适用的. 图9-4也标出了Smith 对钠的实验结果，它

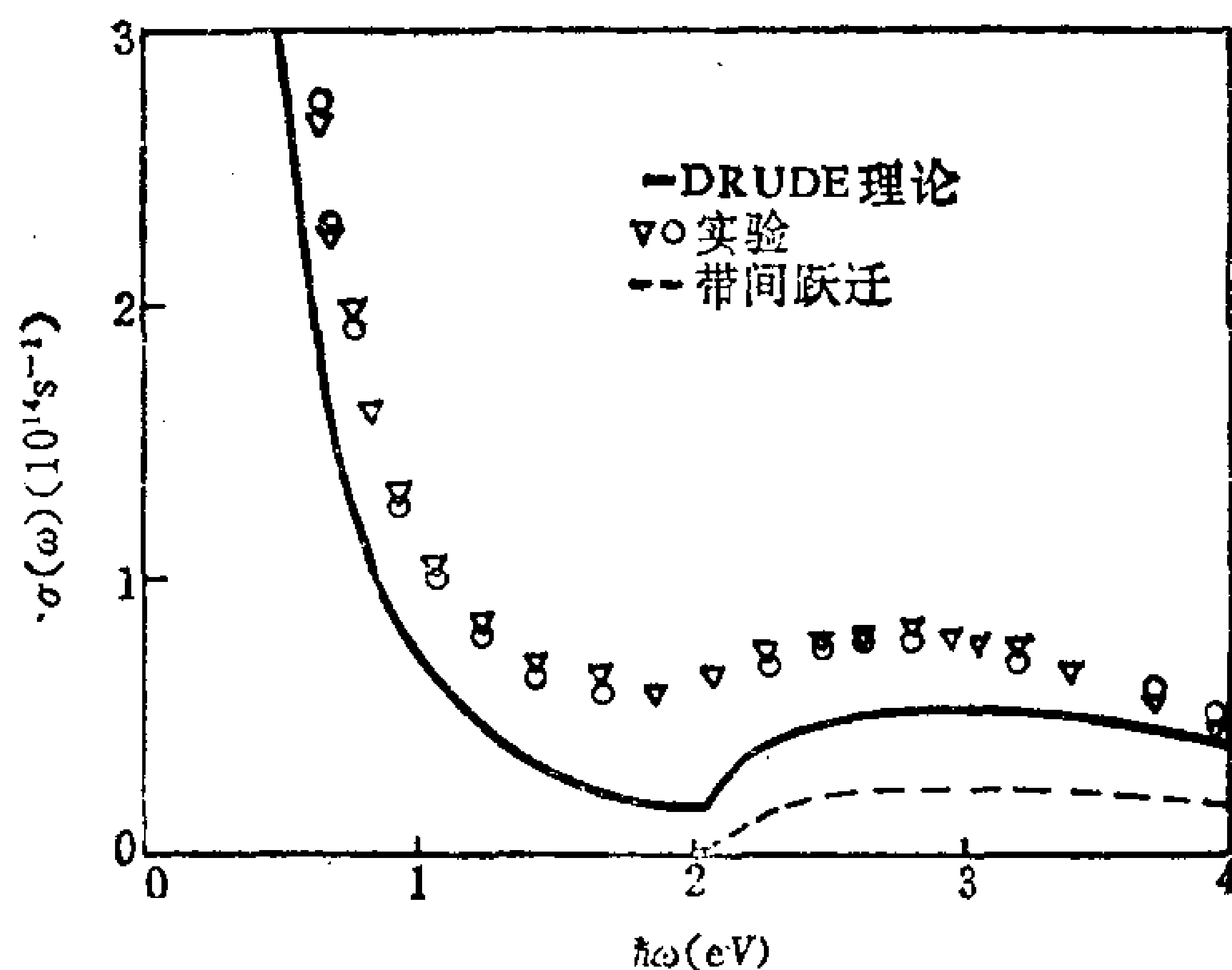


图 9.4 金属钠的光电导

与理论是符合的. 在K、Rb、Cs 和 Li 中也观察到相似的结果. Wilson-Butcher 理论未包括高次项，与实验并不完全符合. 对多价金属如 Al 需要新的公式，因为平行带之间的跃迁在低光子频率部分引起新的结构.

§ 9.4 金属的红外性质、杂质

金属很容易吸收红外波段的光辐射. 这种吸收是由杂质或声子或二者联合作用引起的. 本节讨论杂质和声子的效应. 系统的哈密顿量是均匀电子气的哈密顿量加声子和杂质与电子相互作用的哈密顿量.

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_{ee}+\hat{V}$$

$$\hat{H}_0=\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\varepsilon_{\boldsymbol{k}}C^{+}_{\boldsymbol{k}\sigma}C_{\boldsymbol{k}\sigma}+\sum_{\boldsymbol{q},\lambda}\Omega_{\lambda}(\boldsymbol{q})a^{+}_{\boldsymbol{q}\lambda}a_{\boldsymbol{q}\lambda}$$

$$\hat{H}_{ee}=\frac{1}{2V}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\boldsymbol{q}}V(\boldsymbol{q})C^{+}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}C^{+}_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}\sigma'}C_{\boldsymbol{k}'\sigma'}C_{\boldsymbol{k}\sigma}$$

(9.4.1)

$$\hat{V}=\sum_{q}\rho(q)\left[\frac{1}{V}V_{i}(q)\rho_{i}(q)+\frac{1}{V^{1/2}}\sum_{\lambda}g_{q\lambda}(a_{q\lambda}+a_{q\lambda}^{+})\right]$$

应该注意到，考虑到电子-声子相互作用后，总介电常数变为

$$\varepsilon_{\text{eff}}(q,\mathrm{i}\omega)=1-P(q,\mathrm{i}\omega)\left[V(q)+\sum_{\lambda}g_{q\lambda}^{2}\mathscr{D}_{\lambda}^{0}(q,\mathrm{i}\omega)\right] \tag{9.4.2}$$

它包括库仑势$V(q)=4\pi e^{2}/q^{2}$和由声子作媒介的电子-电子间相互作用，即(9.4.2)式方括弧中的第二项．$\mathscr{D}_{\lambda}^{0}(q,\mathrm{i}\omega)$是自由声子的松原函数．(9.4.2)式中的$P$即正规极化部分$\Pi^{*}$，为了不与$\Pi(\mathrm{i}\omega)$的记法相混，现在用$P$表示．杂质对$\Pi(\omega)$的贡献准确到$n_{i}$级由(9.2.17)式表示．但(9.2.17)式只包括了电子-电子相互作用对介电常数的贡献。考虑了声子效应以后此式应改写为

$$\Pi(\mathrm{i}\omega)=\frac{n_{i}e^{2}}{m^{2}(\mathrm{i}\omega)^{2}V}\sum_{q}q_{\mu}^{2}V_{i}(q)^{2}$$

$$\times\left[\frac{P(q,\mathrm{i}\omega)}{\varepsilon_{\text{eff}}(q,\mathrm{i}\omega)}-\frac{P(q,0)}{\varepsilon_{\text{eff}}(q,0)}\right] \tag{9.4.3}$$

其推导步骤与推导$\varepsilon_{\text{eff}}(q,\mathrm{i}\omega)$的步骤相同．介电常数$\varepsilon_{\text{eff}}$同时包括电子-空穴对激发和辐射声子．

将电子的屏蔽相互作用(现在还包括声子引起的电子间相互作用)记为$W(q,\mathrm{i}\omega)$．由第五章的讨论我们有

$$W(q,\mathrm{i}\omega)=\frac{V(q)+V_{\text{ph}}}{1-P(q,\mathrm{i}\omega)[V(q)+V_{\text{ph}}]} \tag{9.4.4}$$

$$V_{\text{ph}}=\sum_{\lambda}g_{q\lambda}^{2}\mathscr{D}_{\lambda}^{0}(q,\mathrm{i}\omega) \tag{9.4.5}$$

用代数方法可推出下面的公式

$$W(q,\mathrm{i}\omega)=\frac{V(q)}{\varepsilon(q,\mathrm{i}\omega)}+\frac{V_{\text{ph}}}{\varepsilon^{2}(1-PV_{\text{ph}}/\varepsilon)} \tag{9.4.6}$$

$$\varepsilon=1-V(q)P(q,\mathrm{i}\omega)$$

我们对低频区感兴趣，在此区域 $\mathrm{Im}(\varepsilon)\ll\mathrm{Re}(\varepsilon)$，故可取近似 $\mathrm{Im}(1/\varepsilon^2)\approx\frac{2}{\varepsilon}\mathrm{Im}(1/\varepsilon)$. 当包括电子-电子和电子-声子相互作用时，我们有

$$\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)=\frac{\omega_\lambda(\boldsymbol{q})}{\Omega_{q\lambda}}\,\frac{\mathscr{D}_\lambda^0}{1-PV_{\mathrm{ph}}/\varepsilon}$$

$$\tilde{g}_\lambda^2=\frac{\Omega_\lambda}{\omega_\lambda}g_\lambda^2 \tag{9.4.7}$$

$$\bar{g}_{q\lambda}=\left(\frac{\Omega_\lambda}{\omega_\lambda}\right)\frac{g_\lambda^2}{\varepsilon(\boldsymbol{q})^2}=\frac{\tilde{g}_\lambda^2}{\varepsilon(\boldsymbol{q})^2}$$

$\omega_\lambda(\boldsymbol{q})$ 是重正化后的声子频率. $\tilde{g}_\lambda$ 是重整化后的电子-声子相互作用矩阵元，$\bar{g}_{q\lambda}$ 是屏蔽矩阵元. 用这些量可以得到

$$\mathrm{Im}[W(\boldsymbol{q},\omega)]=\left\{V(\boldsymbol{q})+\frac{2}{\varepsilon(\boldsymbol{q})}\sum_\lambda\tilde{g}_\lambda^2\mathrm{Re}[\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},\omega)]\right\}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right]$$

$$+\sum_\lambda\bar{g}_\lambda^2\mathrm{Im}[\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},\omega)] \tag{9.4.8}$$

这个方程包含两类不同的项，第一类与 $\mathrm{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$ 成正比，给出电子气中产生电子-空穴对激发的几率. 第二类与 $\mathrm{Im}(\mathscr{D}_\lambda)$ 成正比，是产生声子的几率.

为进一步计算(9.4.3)式需要讨论函数 $P/\varepsilon_{\mathrm{eff}}$，现记为 $C(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)$. 用代数方法可将其分为两项，

$$C(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)=\frac{P}{\varepsilon_{\mathrm{eff}}}=\frac{P}{1-P[V(\boldsymbol{q})+V_{\mathrm{ph}}]}$$

$$=\frac{P}{1-PV(\boldsymbol{q})}+\frac{P^2V_{\mathrm{ph}}}{\varepsilon^2(1-V_{\mathrm{ph}}P/\varepsilon)} \tag{9.4.9}$$

上式第二项中 $(P/\varepsilon)^2$ 的虚数部分为

$$\mathrm{Im}\left(\frac{P^2}{\varepsilon^2}\right)=\frac{1}{V(\boldsymbol{q})^2}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}-\frac{2}{\varepsilon}+1\right)$$

$$\approx \frac{1}{V(\boldsymbol{q})^2}\left(\frac{1}{|\varepsilon|}-1\right)\mathrm{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)$$

$$\approx \frac{2\mathrm{Re}[P(q)]}{V(\boldsymbol{q})|\varepsilon|}\mathrm{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) \qquad (9.4.10)$$

由此可以得到

$$\mathrm{Im}[C(\boldsymbol{q},\omega)]=\mathrm{Im}\left[\frac{P(\boldsymbol{q},\omega)}{\varepsilon_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{q},\omega)}\right]$$

$$=\frac{1}{V(\boldsymbol{q})}\left\{1+2\left[\frac{P(q)}{\varepsilon(q)}\right]\sum_{\lambda}\tilde{g}_{\lambda}^{2}\mathrm{Re}[\mathscr{D}_{\lambda}(\boldsymbol{q},\omega)]\right\}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right]$$

$$+\frac{P(\boldsymbol{q})^2}{\varepsilon(\boldsymbol{q})^2}\sum_{\lambda}\tilde{g}_{\lambda}^{2}\mathrm{Im}[\mathscr{D}_{\lambda}(\boldsymbol{q},\omega)] \qquad (9.4.11)$$

这个方程也包括两种类型的项，分别相应于电子-空穴对激发和声子辐射. 用谱表示可将$C(\boldsymbol{q},z)$函数写为

$$C(\boldsymbol{q},z)=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\frac{\mathrm{Im}[C(\boldsymbol{q},\omega')]}{\omega'-z} \qquad (9.4.12)$$

这样，从(9.4.3)式就可得到$\Pi_i(\mathrm{i}\omega)$的形式表示、推迟函数 $\Pi_i(\omega)$和电导 $\sigma_i(\omega)$

$$\Pi_i(\mathrm{i}\omega)=\frac{n_i e^2}{m^2(\mathrm{i}\omega)^2}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}q_\mu^2 V_i(\boldsymbol{q})^2\int\frac{\mathrm{d}\omega'}{\pi}\mathrm{Im}[c(\boldsymbol{q},\omega')]$$

$$\times\left(\frac{1}{\omega'-\mathrm{i}\omega}-\frac{1}{\omega'}\right) \qquad (9.4.13)$$

$$\sigma_i(\omega)=\frac{\mathrm{i}\Pi_i(\omega)}{\omega}=\frac{\mathrm{i}n_i e^2}{m^2\omega^2}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}q_\mu^2 V_i(\boldsymbol{q})^2$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega'}{\pi}\mathrm{Im}[c(\boldsymbol{q},\omega')]\left(\frac{1}{\omega'-\omega-i\delta}-\frac{1}{\omega'}\right) \qquad (9.4.14)$$

$$\mathrm{Re}[\sigma_i(\omega)]=-\frac{n_i e^2}{m^2\omega^3}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}q_\mu^2 V_i(\boldsymbol{q})^2\mathrm{Im}[c(\boldsymbol{q},\omega)] \qquad (9.4.15)$$

由(9.4.11)式可以看出，$\mathrm{Re}[\sigma(\omega)]$也包含两种类型的项，其中一项有因子 $\mathrm{Im}[1/\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)]$. 谱的远红外部分的频率低于等离子体

振荡频率，因此可用纵介电常数的低频极限，这时 $\mathrm{Im}[1/\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)]$ 与 ω 成正比．其它因子 $|P(\boldsymbol{q},\omega)|$ 与 $|\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)|$ 取它们在 $\omega=0$ 的值，这时它们是实数 $P(\boldsymbol{q})$ 和 $\varepsilon(\boldsymbol{q})$．线性关系 $\mathrm{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)\approx\omega$ 是由电子气中产生低能电子-空穴对引起的．光子能量产生了电子-空穴对，电子-空穴对有一定动量，此动量是由与密度为 n_i 的杂质相互作用引起的．电子-空穴对的能量在一定区间连续分布，固体可吸收此区间任何频率的光辐射．

以上说明也可应用于声子引起的变化．现在电子-空穴对产生的几率与下面的因子成正比，

$$1+\frac{2P(\boldsymbol{q})}{\varepsilon(\boldsymbol{q})}\sum_{\lambda}\tilde{g}_{\lambda}^{2}\mathrm{Re}[\mathscr{D}(\boldsymbol{q},\omega)]$$

其中 $\tilde{g}_{\lambda}$ 是重整化的电子-声子相互作用矩阵元．上式第二项是声子引起的介电常数对频率的依赖性，这个效应在高频($\omega\gg\omega_{\lambda}$)可以忽略，但在与声子能量相当的频率区间不能忽略．

(9.4.11)式第二项有因子 $\tilde{g}^{2}_{\lambda}\mathrm{Im}[\mathscr{D}_{\lambda}(\boldsymbol{q},\omega)]$，它相应于光子产生一个声子的过程．只有光子能量处于声子能量范围时才会有光吸收．光子极化了电子气，极化了的电子气辐射声子．通过极化因子 $P(\boldsymbol{q})^{2}$ 并乘以 $\tilde{g}_{\lambda}^{2}\mathrm{Im}[\mathscr{D}_{\lambda}]$ 产生耦合．总起来，电子气可以产生两种激发；声子和电子-空穴对，而杂质的存在使光子可能产生这两种激发．

光子也可能同时激发两个或更多的声子．这个过程也包括在以上的方程中．极化 $P(\boldsymbol{q},\omega)$ 由两条电子线组成，但可以有声子过程作为内线．声子可以是电子线的自能部分或顶角部分．这样，因子 $\mathrm{Im}[P(\boldsymbol{q},\omega)]$ 就包含声子的产生和消灭过程，一般情况下可以忽略这些过程．

§9.5 金属的红外性质,声子

所有固体在红外波段(10—100μm之间)都具有一个由于光子与晶格振动相互作用所引起的吸收区. 对离子晶体，长光学横波声子可以和红外光子发生耦合. 光的电场使正负离子沿着相反方向位移，形成电偶极矩使晶格极化，偶极矩从光电磁场中吸收能量. 当外加光电磁场的频率等于晶格振动模式的频率时，这种光吸收达到极大. 纯元素晶体中不存存固有电偶极矩与电磁场之间的耦合，所以不具有产生单个声子的光吸收过程. 但对这种晶体仍观察到晶格振动的吸收光谱. 实际上这是一种二级过程；光电场感应产生电偶极矩，它反过来又与光电场耦合引起光吸收. 或者说,光与声子的相互作用是通过电子-声子相互作用实现的. 在金属中光子能量转变为玻色型激发即声子和电子-空穴对. 这些激发的动量大于光子所提供的动量，因此直接过程；光子→电子-空穴对或光子→声子是不允许的. 对离子晶体中的极化声子，这些过程是允许的. 纯金属吸收光辐射的基本过程是产生波矢为 $\boldsymbol{q}$ 和 $-\boldsymbol{q}$ 的两个激发,其和为光子的波矢 $\boldsymbol{k}\approx 0$,这将在后面说明. 对均匀电子气,不考虑声子时可以考虑光子转变为两个电子-空穴对,其动量分别为 $\boldsymbol{q}$ 和 $-\boldsymbol{q}$,但这个过程不可能发生，因为均匀电子气不吸收光. 考虑了电子-声子相互作用后,这个过程变成允许的了,因为电子-声子相互作用破坏了均匀性.

哈密顿量是(9.4.1)式但不包括杂质效应. 相关函数是(9.2.13)式,此式可重写为

$$\Pi(\mathrm{i}\omega)=-\frac{e^2}{m^2(\mathrm{i}\omega)^2}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}q_\mu^2[\langle\rho(\boldsymbol{q})\Phi(\boldsymbol{q})\rangle+M(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)]$$

(9.5.1)

$$M(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)=-\sum_{\boldsymbol{q}'}\frac{q'_\mu}{q_\mu}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\langle T_\tau\hat{\rho}(\boldsymbol{q},\tau)\hat{\rho}(\boldsymbol{q}',0)\ \Phi(\boldsymbol{q},\tau)\ \Phi(\boldsymbol{q}',0)\rangle$$

$$\Phi(\boldsymbol{q},\tau)=\sum_\lambda g_{\boldsymbol{q}\lambda}(a_{\boldsymbol{q}\lambda}+a^+_{\boldsymbol{q}\lambda}) \tag{9.5.2}$$

(9.5.1)式中的两个相关函数不能准确求出．为了作级数展开，我们需要找出某种小参量，这个小参量就是电子-声子矩阵元的平方 $g^2_{\boldsymbol{q}\lambda}$．我们将求到 $g^2_{\boldsymbol{q}\lambda}$ 和$(g^2_{\boldsymbol{q}\lambda})^2$级．

对 $g^2_{\boldsymbol{q}\lambda}$ 级，相关函数(9.5.2)式可分为声子部分和电子部分，并满足条件 $\boldsymbol{q}'=-\boldsymbol{q}$．

$$\begin{aligned}M(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)&=\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\langle T_\tau\hat{\rho}(\boldsymbol{q},\tau)\hat{\rho}(-\boldsymbol{q},0)\ \rangle\langle T_\tau\Phi(\boldsymbol{q},\tau)\ \Phi(\boldsymbol{q},0)\rangle\\&=\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\langle T_\tau\hat{\rho}(\boldsymbol{q},\tau)\hat{\rho}(-\boldsymbol{q},0)\rangle V_{\mathrm{ph}}(\boldsymbol{q},0)\\&=\frac{\beta}{1}\sum_{\mathrm{i}\omega n',\lambda} g^2_{\boldsymbol{q}\lambda}\mathscr{D}^0_\lambda(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega'_n)\frac{P(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega+\mathrm{i}\omega')}{\varepsilon(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega+\mathrm{i}\omega')}\end{aligned} \tag{9.5.3}$$

对最低级，密度-密度相关函数给出极化 $P'(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)$(相当于第三章中的$\Pi^0$)．当包括电子-电子相互作用时，可以对由库仑势$V(\boldsymbol{q})$连接的极化图求和．这样可得到均匀电子气纵介电常数的倒数．同样的求和也出现力-力相关函数中．

声子松原函数也出现在(9.5.3)式中．可将其中的$\mathscr{D}^0$用$\mathscr{D}$代替，并用 $\tilde{g}_{\boldsymbol{q}\lambda}$ 代替裸矩阵元 $g^2_{\boldsymbol{q}\lambda}$．这个代替包含了图形求和，它包括电子-声子相互作用的高级项．这样，实际上我们是以重整化参量 $\tilde{g}^2_{\boldsymbol{q}\lambda}\mathscr{D}_\lambda$ 作参量对相关函数作级数展开．即我们需要求出下式

$$M_a(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)=\frac{1}{\beta}\sum_{\mathrm{i}\omega_{n'},\lambda}\tilde{g}^2_{\boldsymbol{q}\lambda}\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega_{n'})\frac{P(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega+\mathrm{i}\omega_{n'})}{\varepsilon(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega+\mathrm{i}\omega_{n'})} \tag{9.5.4}$$

将相关函数分为电子部分$\langle\hat{\rho}\hat{\rho}\rangle$和声子部分$\langle\Phi\Phi\rangle$，并对每一部分的图形求和．

相关函数(9.5.1)式还有一个常数项，记为 M_c

$$M_c(\boldsymbol{q})=\langle\rho(\boldsymbol{q})\Phi(\boldsymbol{q})\rangle \tag{9.5.5}$$

(9.5.5)式的级数是极化图的和，这些极化图由 $V(\boldsymbol{q})$ 或 V_{ph} 的线相连. 可以求出

$$M_c(\boldsymbol{q})=-\frac{1}{\beta}\sum_{\mathrm{i}q}\frac{P(q)V_{\mathrm{ph}}}{1-P(q)[V(\boldsymbol{q})+V_{\mathrm{ph}}]} \tag{9.5.6}$$

这个常数正好是 $-M_a(\boldsymbol{q},0)$. 计算 $M_c(q)$ 的另一方法是引入 $Q(\boldsymbol{q},\mathrm{i}q)$

$$Q(q)=\frac{P(q)V_{\mathrm{ph}}}{1-P(q)[V(\boldsymbol{q})+V_{\mathrm{ph}}]}=\frac{P(q)}{\varepsilon(q)}\sum_{\lambda}\tilde{g}_{q\lambda}^2\mathscr{D}_{\lambda}(q)$$

$$M_c(\boldsymbol{q})=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}u}{\pi}n_B(u)\mathrm{Im}[Q(\boldsymbol{q},u)]$$

$$M_c(\boldsymbol{q})=-\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}u}{\pi}[1+n_B(u)]\mathrm{Im}[Q(\boldsymbol{q},u)]$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}[Q(\boldsymbol{q},\omega)]=&\frac{P(q)}{\varepsilon(\boldsymbol{q})}\sum_{\lambda}\tilde{g}_{q\lambda}^2\mathrm{Im}[\mathscr{D}_{\lambda}(\boldsymbol{q},\omega)]\\&+\frac{1}{V(\boldsymbol{q})}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right]\sum_{\lambda}\tilde{g}_{q\lambda}^2\mathrm{Re}[\mathscr{D}_{\lambda}(\boldsymbol{q},\omega)]\end{aligned} \tag{9.5.7}$$

在 M_c 的第二个表示式中负频部分的积分已变为正频部分的积分，并利用了等式 $\mathrm{Im}[Q(\boldsymbol{q},-u)]=-\mathrm{Im}[Q(\boldsymbol{q},u)]$. 定义一个新的函数 M_a'

$$\begin{aligned}M_a'(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)&=M_a(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)+M_c(\boldsymbol{q})\\&=M_a(\boldsymbol{q},\mathrm{i}\omega)-M_a(\boldsymbol{q},0)\end{aligned} \tag{9.5.8}$$

$\mathrm{i}\omega\to0$ 时这个量等于零.

现在对松原频率求和. 由(9.5.4)式可以看出，求和可写为以下形式

$$S(\mathrm{i}\omega)=\frac{1}{\beta}\sum_{\mathrm{i}q}X(\mathrm{i}q)Y(\mathrm{i}q+\mathrm{i}\omega) \tag{9.5.9}$$

对 iq 的求和用迴路积分作出. 当 $X(z)$和$Y(z)$ 的宗量等于实数时有两条割线,沿割线的积分由 $X(u)$和$Y(u)$ 的推迟函数的虚数部分给出

$$S(\mathrm{i}\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\mu}{\pi}n_B(u)\{\mathrm{Im}[X(u)]Y(u+\mathrm{i}\omega)$$
$$+X(u-\mathrm{i}\omega)\mathrm{Im}[Y(u)]\}$$

用相似于(9.4.12)式的方法可将上式写为

$$S(\mathrm{i}\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}u}{\pi}\mathrm{Im}[X(u)]$$
$$\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}u'}{\pi}\mathrm{Im}Y(u')\left[\frac{n_B(u')-n_B(u)}{u-u'+\mathrm{i}\omega}\right] \tag{9.5.10}$$

为使所有积分变量都是正的, 作变换 $-u\to u$, 并利用玻色函数的性质 $\mathrm{Im}[X(-u)]=-\mathrm{Im}[X(u)]$, 我们得到

$$S(\mathrm{i}\omega)=\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}u}{\pi}\mathrm{Im}[X(u)]\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}u'}{\pi}\mathrm{Im}[Y(u')]K(u,u',\mathrm{i}\omega) \tag{9.5.11}$$

$$K(u,u',\mathrm{i}\omega)=[n_B(u')-n_B(u)]\left(\frac{1}{u-u'+\mathrm{i}\omega}+\frac{1}{u-u'-\mathrm{i}\omega}\right)$$
$$+[1+n_B(u)+n_B(u')]\left(\frac{1}{u+u'+\mathrm{i}\omega}+\frac{1}{u+u'-\mathrm{i}\omega}\right) \tag{9.5.12}$$

S 有对称性 $S(-\mathrm{i}\omega)=S(\mathrm{i}\omega)$.

可以用这个结果计算相关函数 (9.5.3) 式及 M_c. 这时函数 $X(u)$和$Y(u)$即 $\mathscr{D}(\boldsymbol{q},u)$ 和$\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},u)}-1\right]$. 这样我们有

$$M'_a(\boldsymbol{q},i\omega)=\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}u}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}u'}{\pi}[K(u,u',\omega)-K(u,u'0)]$$
$$\times\frac{1}{V(\boldsymbol{q})}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},u)}\right]\sum_{\lambda}\tilde{g}^2_{q\lambda}\mathrm{Im}[\mathscr{D}_{\lambda}(\boldsymbol{q},\omega)] \tag{9.5.13}$$

M'_a 只包含电子-声子耦合常数 $\tilde{g}^2_{q\lambda}$ 的一次幂．这一项是Π的主要部分，已用在金属红外性质的很多计算中．$\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},u)}\right]$相应于电子气中产生电子-空穴的几率．$\mathrm{Im}\mathscr{D}_\lambda$ 是产生声子的几率．M'_a 的物理解释为，光子产生了能量为 $\omega_{q\lambda}$ 的声子和能量 $\omega-\omega_{q\lambda}$ 的电子-空穴对．光波极化了电子气，这个极化又与声子相互作用而产生激发。将这些过程对Π的贡献记为$\Pi_a(\mathrm{i}\omega)$．推迟函数$\Pi_a(\omega)$是

$$\Pi_a(\omega)=-\frac{e^2}{m^2\omega^2}\int\frac{\mathrm{d}^3\mathrm{q}}{(2\pi)^3}q^2_\mu M'_a(\boldsymbol{q},\omega) \tag{9.5.14}$$

$$\begin{aligned}\Pi_a(\omega)=&-\frac{e^2}{m^2\omega^2}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}q^2_\mu\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}u}{\pi}\left\{\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}u'}{\pi}K(u,u',\omega+\mathrm{i}\delta)\right.\\&\times\frac{1}{V(q)}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},u)}\right]\sum_\lambda\tilde{g}^2_{q\lambda}\mathrm{Im}[\mathscr{D}(\boldsymbol{q},u')]\\&\left.-[1+2n_B(u)]\mathrm{Im}[Q(\boldsymbol{q},u)]\right\}\end{aligned} \tag{9.5.15}$$

我们需要这个函数的虚数部分．很多计算是对 $T=0$ 作的，这时积分核 $K(u',u',\omega+\mathrm{i}\delta)$变为

$$\lim_{T\to0}\mathrm{Im}[K(u,u',\omega+\mathrm{i}\delta)]=\pi[\delta(u+u'-\omega)-\delta(u+u'+\omega)]$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}[\sigma_a(\omega)]&=-\mathrm{Im}\left[\frac{\pi_a(\omega)}{\omega}\right]\\&=\frac{e^2}{m^2\omega^3}\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}q^2_\mu\int_0^\omega\frac{\mathrm{d}u}{\pi}\frac{1}{V(\boldsymbol{q})}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega-u)}\right]\\&\quad\times\sum_\lambda\tilde{g}^2_{q\lambda}\mathrm{Im}[\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},u)]\end{aligned} \tag{9.5.16}$$

对 $\mathrm{Im}[\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)]$用 RPA 近似，则当 ω 小时有

$$\begin{aligned}\frac{1}{V(\boldsymbol{q})}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right]&=\frac{1}{V(\boldsymbol{q})}\frac{-\mathrm{Im}[\varepsilon(\boldsymbol{q},\omega)]}{\varepsilon(\boldsymbol{q})^2}\\&=\frac{\omega m^2\theta(2k_F-q)}{2\pi\varepsilon(\boldsymbol{q})^2}\end{aligned}$$

引入函数$\alpha^2_{\mathrm{tr}}(u)F(u)$定义如下

$$\alpha_{\mathrm{tr}}^2(u)F(u)=\frac{m}{4\pi^2 n_0}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{q_\mu^2}{q}\sum_\lambda\frac{\tilde{g}_{q\lambda}^2}{\varepsilon(\boldsymbol{q})^2}B_\lambda(\tilde{g},u)\theta(2k_{\mathrm{F}}-q) \tag{9.5.17}$$

其中 $B_\lambda(q,u)=-(1/\pi)\mathrm{Im}[\mathscr{D}_\lambda(q,u)]$ 是声子谱函数. α_{tr}^2F 表示一个函数，不是两个函数的乘积. $\tilde{g}_{q\lambda}^2/\varepsilon(\boldsymbol{q})^2$ 是屏蔽电子-声子矩阵元的平方. 用以上定义可得到 Allen 的光电导公式

$$\mathrm{Re}[\sigma_a(\omega)]=\frac{2\pi e^2 n_0}{m\omega^3}\int_0^\omega \mathrm{d}u(\omega-u)\alpha_{\mathrm{tr}}^2(u)F(u) \tag{9.5.18}$$

有时用 Drude 公式定义弛豫时间 $\tau(\omega)$

$$\sigma(\omega)=\frac{n_0e^2}{m[1/\tau(\omega)-i\omega]}$$

对 $\omega\tau\gg1$,展开上式,得到

$$\begin{aligned}\sigma(\omega)&=\frac{n_0e^2}{\mathrm{i}\omega m}\frac{1}{1-\mathrm{i}/\tau\omega}\\&=\frac{n_0e^2}{\mathrm{i}\omega m}\left[1+\frac{\mathrm{i}}{\tau\omega}+O(\omega\tau)^{-2}\right]\end{aligned} \tag{9.5.19}$$

第二项是实数,它等于(9.5.18)式中的电导. 这样我们得到

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau(\omega)}&=\frac{\omega^2m}{n_0e^2}\mathrm{Re}[\sigma(\omega)]\\&=\frac{2\pi}{\omega}\int_0^\omega \mathrm{d}u(\omega-u)\alpha_{\mathrm{tr}}^2(u)F(u)\end{aligned} \tag{9.5.20}$$

弛豫时间可由 α_{tr}^2F 进行计算. 已有一些数值计算工作,并与金属的红外光谱进行了比较. α_{tr}^2F 的计算比较复杂，需要考虑金属的声子模,计算量也很大.

§9.6 Drude 公式

Drude 公式是一个经验公式,它描述简单金属如 Na和 Al 的光学性质. 其光电导公式是(9.1.24),可写为

$$\sigma(\omega)=\frac{n_0e^2}{m}\frac{-\mathrm{i}}{\omega-\mathrm{i}/\tau} \tag{9.6.1}$$

τ 是弛豫时间，是一个常数．这个公式在一定程度上与实验符合，在两个极限情况下是准确的．$\omega\to0$ 时，它给出直流电导 $\sigma=n_0e^2\tau/m$．对高频响应，即当 ω 满足 $\omega_{\mathrm{D}}<\omega<\omega_{\mathrm{I}B}$ 时，Drude 公式也是准准的，ω_{D} 是德拜频率，$\omega_{\mathrm{I}B}$ 是带间跃迁的频率．对 $\omega\tau\gg1$ 我们有

$$\mathrm{Re}[\sigma(\omega)]=\frac{n_0e^2}{m}\frac{\tau}{1+(\omega\tau)^2}\approx\frac{n_0e^2}{m\tau}\frac{1}{\omega^2} \tag{9.6.2}$$

由前面几节的结果可以推出 Drude 公式．对由力-力相关函数得到的结果取直流极限，由(9.5.10)式

$$\lim_{\omega\to0}\left[\frac{\mathrm{Im}[S(\omega)]}{\omega}\right]=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}u}{\pi}\mathrm{Im}[X(u)]\mathrm{Im}[Y(u)]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}n_B(u) \tag{9.6.3}$$

其中

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}[X(u)]&=\sum_\lambda\tilde{g}_{q\lambda}^2\mathrm{Im}[\mathscr{D}_\lambda(\boldsymbol{q},u)]\\&\approx\pi\sum_\lambda\tilde{g}_{q\lambda}^2\{\delta[\omega_{q\lambda}-u]-\delta[\omega_{q\lambda}+u]\}\end{aligned}$$

$$\mathrm{Im}[Y(u)]=\frac{1}{V(\boldsymbol{q})}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(\boldsymbol{q},u)}\right]=\frac{um^2\theta(2k_{\mathrm{F}}-q)}{2\pi q\varepsilon(\boldsymbol{q})} \tag{9.6.4}$$

$\omega\to0$ 时由力-力相关函数可以得到

$$\begin{aligned}\lim_{\omega\to0}\mathrm{Re}[\sigma(\omega)]=&\lim_{\omega\to0}\frac{2e^2}{\omega^2}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{q_\mu^2}{2\pi q}\theta(2k_{\mathrm{F}}-q)\\&\times\sum_\lambda\omega_{q\lambda}\left|\frac{\tilde{g}_{q\lambda}}{\varepsilon(\boldsymbol{q})}\right|^2\left(-\frac{\mathrm{d}n_B}{\mathrm{d}u}\right)_{u=\omega_{q\lambda}}\end{aligned} \tag{9.6.5}$$

此式包含对金属中声子模的复杂积分．我们知道 Ziman 曾推导出金属的直流电阻率 $\rho(T)$

$$\rho(T)=\frac{m}{n_0e^2}\frac{1}{\tau}$$

$$\frac{1}{\tau}=\frac{m}{16\pi^2\rho k_{\mathrm{F}}^3}\sum_\lambda\int_{q<2k_{\mathrm{F}}}q\mathrm{d}^3q\,|W(q)|^2(\xi_\lambda\cdot q)^2\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\omega}n_B(\omega)\right]_{\omega=\omega_{q\lambda}} \tag{9.6.6}$$

其中$W(q)$是屏蔽电子-离子势，一般取赝势被介电常数除，ξ_λ是声子极化矢量，ρ是密度．由力-力相关函数得到的结果为

$$\lim_{\omega\to0}\mathrm{Re}[\sigma(\omega)]=\frac{n_0e^2}{n\omega^2}\frac{1}{\tau}$$

$$\frac{1}{\tau}=\frac{2m}{16\pi^2k_{\mathrm{F}}^3}\sum_\lambda\int_{q<2k_{\mathrm{F}}}q\mathrm{d}^3q\left|\frac{\tilde{g}_{q\lambda}^2}{\varepsilon(q)}\right|^2\omega_{q\lambda}\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\omega}n_B(\omega)\right]_{\omega_{q\lambda}} \tag{9.6.7}$$

注意到由电子-离子赝势定义的电子-离子矩阵元为

$$\left|\frac{\bar{g}}{\varepsilon}\right|^2=W(q)^2(\xi\cdot q)/2\rho\omega_\lambda$$

则 (9.6.6)、(9.6.7)式两个 $1/\tau$ 的表达式是完全等价的．因此 *Ziman* 公式中的 τ 也描写高频响应．

这样，在 $\omega\to0$ 的极限下我们推导出了(9.6.2)式．Mahan 曾证明，室温下(9.6.2)式在高频也是正确的．但在这两个极限之间(9.6.1)式是不准确的．

参 考 文 献

[1] J.M.Ziman, *Principle of The Theory of Solids*, Cambridge University. Press, London, (1972).

[2] W.Jones, N.H. March, *Theoretical Solid State Physics, John Wiley and Son, London*, (1973).

[3] G.D.Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York, (1981).

[4] *J.J.Hopfield, Phys. Rev., A*139(1965), 419.

[5] *G.D.Mahan, J.Phys. Chem. Solids*, 31(1970), 1477.

[6] M. Hasegawa, M. Watabe, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 27(1969), 1393.

第十章　无 序 系 统

§ 10.1　无 序 种 类

如果你仔细想一下就会看到，无论是我们周围世界中的物理系统，还是化学系统，生物系统，乃至地理、社会现象，都常有对其组成元素(或因素)的无规性质．例如，无序合金，掺杂半导体，非晶金属和半导体，非晶磁，液晶等．

在固体物理中当谈到无序一词时，总是表示从分子原子微观结构观点看来，系统不具有完全的长程周期性．当然，对于不同材料，偏离完全周期性的方式不同．那么这种原子结构上的无序可划为几种类型呢？

图 10.1(a)表示一个完整晶体，图 10.1(b) 表示共价键晶体(图中每个原子有三个键)．图 10.1(c)表示一具有平移不变性的周期格子中，有

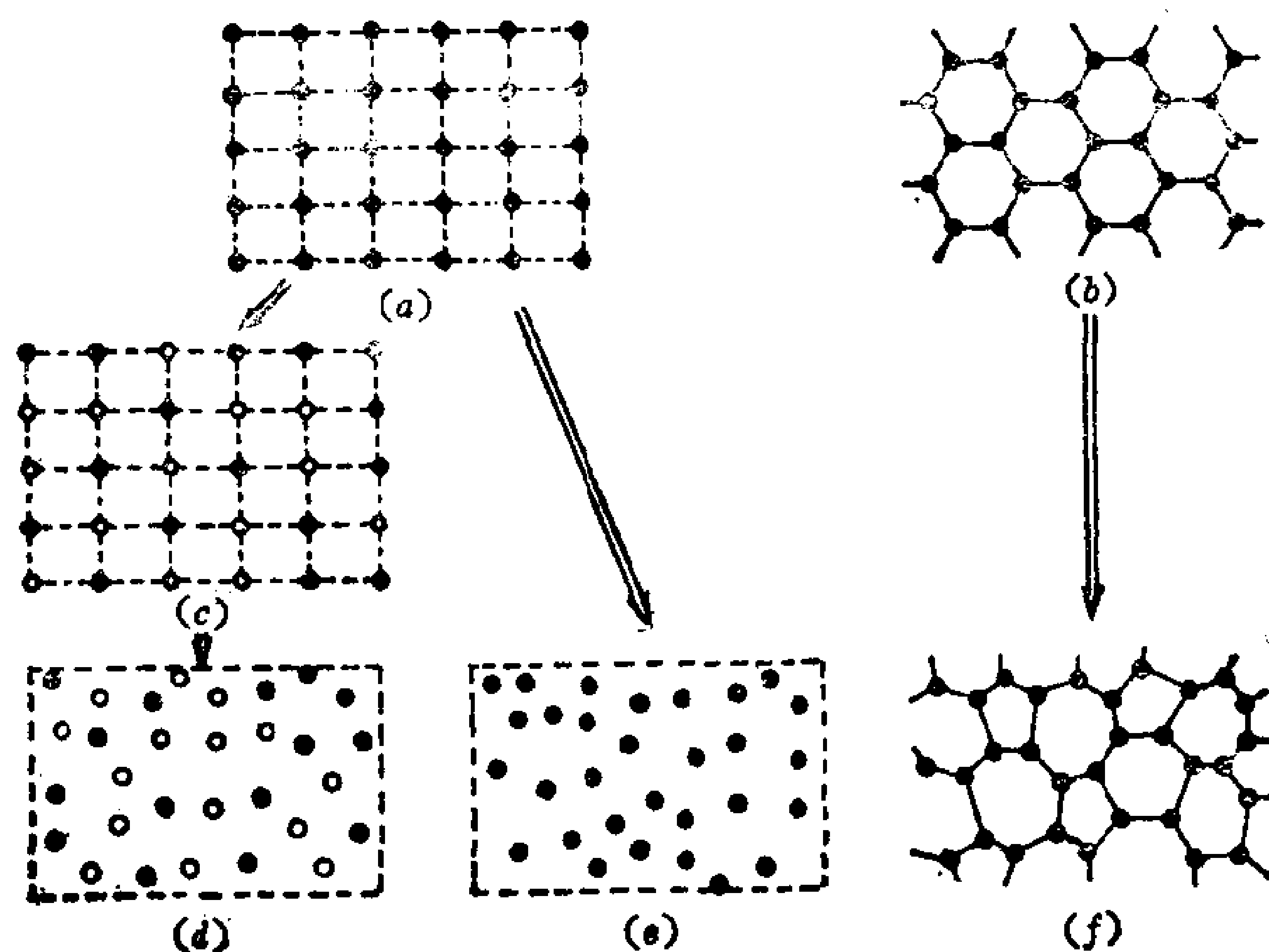


图 10.1　无序类型

两种原子无规分布在各格点上．图中黑点和白圆圈各代表一种原子．当然也可以是多种原子的无规分布．通称这种类型的无序为替代式无序（*Substitutional disorder*）．另一种无序可以分别从图 10-1(*a*)和(*c*)由破坏其原子位置上的完全周期性而得到，分别用图 10-1(*d*)(*e*)表示，称这种类型的无序为结构无序（*structural disorder*）．模型(*e*)可用来描述纯液体或纯液态金属，而模型(*d*)则可用来描述多组分液体或液态金属．图 10-1(*f*)由(*b*)变化而来．由图看出，长程序的原子分布完全被破坏了，但短程序依然保持，即每一原子的配位数与相应的有序晶体仍然相同，图(*f*)中每一原子仍以三个共价键同其最近邻原子键合，但与晶态相比，键长和键角均有涨落变化．实际上这种无序也属于结构无序，但鉴于由共价键所形成的网路在决定非晶半导体的不同物理性质上起重要作用，通常把这种无序与(*d*)(*e*)所表示的更一般的结构无序区分开来，称之为拓扑无序(*topological disorder*)．

表 10-1 列举了一些实际材料属于哪种无序系统范畴．

表 10-1

无序类型	实际材料
替代式无序	无序合金 和晶(mixed Crystal) 杂掺半导体
结构无序	非金属液体 液体金属 非晶金属
拓扑无序	非晶半导体

§10.2 模型哈密顿量 无序系统中的格林函数

大家知道，电子、激子、声子、磁振子等等是固体物理中经常讨

论的元激发．这里我们要给出在无序系统中描述这些元激发的一种模型哈密顿量．为具体起见，我们以电子系统为例．当无序系统中的扰动(比如来自每一杂质或缺陷)在空间为局域化时，自然以用坐位表象(*Site representation*)为宜．对于固体电子系统，这相当于采用紧束缚模型去写哈密顿量．假设用原子位势 $v_l(\boldsymbol{r})$ 表示第 l 个原子单独存在时的位势，并设整个系统的位势与诸原子位势之迭加相距不远．

$$V(\boldsymbol{r})\approx\sum_l v_l(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_l) \tag{10.2.1}$$

整个系统的波函数应满足 Schrödinger 方程：

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right\}\Psi(\boldsymbol{r})=E\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{10.2.2}$$

设 ϕ_l 为单原子下 Schrödinger 方程的解，在固体中极靠近一原子的区域，可以预期它仍为一近似解．而整个系统的 Schrödinger 方程之波函数预期可写为诸原子轨道之线性组合(LCAO，即*Linear Combination of Atomic Orbitals*)：

$$\Phi(\boldsymbol{r})=\sum_l a_l\phi_l(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_l) \tag{10.2.3}$$

在完整晶体情况下以(10.2.3)式代入 Schrödinger 方程 (10.2.2)式可得到如下的方程式：

$$(E_l-E)a_l+\sum_{l'\neq l}V_{ll'}a_{l'}=0 \tag{10.2.4}$$

方程式(10.2.4)式又可写为

$$(H-E)a=0 \tag{10.2.5}$$

其哈密顿量矩阵算符为

$$H_{ll'}=E_l\delta_{ll'}+V_{ll'} \tag{10.2.6}$$

在二次量子化形式中，(10.2.6)式相当于：

$$H=\sum_{i} E_{l}C_{l}^{+}C_{l}+\sum_{l\neq l'}V_{ll'}C_{l}^{+}C_{l} \qquad (10.2.7)$$

其中 C_{l}^{+}, C_{l} 分别为在 $\boldsymbol{R}_{l}$ 格位电子的产生算符和消灭算符. 在无序合金理论中通常认为，对于合金的每一化学组分有不同的束缚态能 E_{l}. 另外，一般地说，由于最近邻格位上化学组成的不同组合会导致在相互作用能 $V_{ll'}$ 的无序，这叫非对角无序. 当原子间距离并不都相同时，这种非对角无序就更加重要，例如在半导体中杂质原子"气"的拓扑无序情况下就是如此. 又如对于液体和玻璃情况，其平衡位置 $\boldsymbol{R}_{l}$ 并不与规则晶格拓扑一致，这时 l' 的角标本身或者要用统计意义的项定义或者要用计算机模拟，我们对此不讨论. 我们只限于讨论不同种原子或不同自旋无规地分布于一个规则晶格格位上的情况.

(10.2.4)式可代表紧束缚合金(*Tight-Binding Alloy*,缩写TBA)的固体电子结构性质. 还可证明，简谐近似下的晶格振动满足与(10.2.4)式在数学结构上一样的方程，这时(10.2.4)式中的 a_{l} 应理解为在第 l 格位上原子位移分量，E 应由频率平方 (ω^{2}) 所替代，而

$$E_{l}\rightarrow M_{l}^{-1}\phi_{ll}, V_{ll'}\rightarrow M_{l}^{-1}\phi_{ll'} \qquad (10.2.8)$$

其中 $\phi_{ll'}$ 代表力常数，M_{l} 为原子质量. 无序系统中的原子振动将引起力常数变化. 另外，自旋波或磁振子是磁材料中的元激发，它与声子相类似，也可由同样结构的数学方程描述.

总之，用对角元素 E_{l} 以及非对角元素 $V_{ll'}$ 引入的无序只须由这些参量的统计性质来定义，而不必管这些无序的来源是原子的、磁的或无序合金等.

下面采用格林函数研究，格林函数的定义为:

$$(E-H)G(E)=1$$

或写为

$$G(E)=(E-H)^{-1} \tag{10.2.9}$$

利用(10.2.6)式的H矩阵表示可将(10.2.9)式写为:

$$\sum_{l'}\{H_{ll'}-E\delta_{ll'}\}G_{ll''}\ (E)=-\delta_{ll''} \tag{10.2.10}$$

在研究无序系统时,为反映各原子微观位形的无序宏观效果,取:

$$\langle G_{ll'}(E)\rangle\equiv G_{\mathrm{av}}(E) \tag{10.2.11}$$

其中$\langle\cdots\rangle$表示对所有可能的原子微观位移的系综平均. 注意, 平均后的 $G_{\mathrm{av}}(E)$具有完整晶格的平移对称性,即 $G_{\mathrm{av}}(E)$ 只与$\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}'$有关,可写为

$$G_{\mathrm{av}}(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}',E) \tag{10.2.12}$$

对于 G_{av} 常写为:

$$G_{\mathrm{av}}(E)=(EI-H_{\mathrm{eff}})^{-1} \tag{10.2.13}$$

其中 I 为单位算符,H_{eff} 为有效哈密顿量,它与平均后的格林函数相关.

格林函数的重要性质是,在哈密顿量为对角矩阵的表象中,格林函数也是对角的;格林函数的极点对应于(10.2.5)式的本征值. 每原子的电子态密度由下式计算:

$$\begin{aligned}\rho(E)&=N^{-1}\mathrm{Tr}\{\langle\delta(EI-H)\rangle\}\\&=-(\pi N)^{-1}\mathrm{Im}\{\mathrm{Tr}\{G_{\mathrm{av}}(E+\mathrm{i}0)\}\}\end{aligned} \tag{10.2.14}$$

有时常写:

$$G_{\mathrm{av}}(E+i0)\equiv G_{\mathrm{av}}^{+} \tag{10.2.15}$$

由于在作系综平均后, 晶体的平移不变对称性恢复,所以 G_{av} 和 H_{eff} 也都具有平移不变性, 从而在 Bloch 表示中它们是对角的,即可写:

$$\langle\boldsymbol{k}|G_{\mathrm{av}}(z)|\boldsymbol{k}'\rangle\equiv\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}G_{\mathrm{av}}(z;\boldsymbol{k}) \tag{10.2.16}$$

而对有效哈密顿量可有:

$$\langle\boldsymbol{k}|H_{\mathrm{eff}}(z)|\boldsymbol{k}'\rangle=\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}[\epsilon(\boldsymbol{k})+\Sigma_{i}(z,\boldsymbol{k})] \tag{10.2.17}$$

(这里 z 表示复数能量变量)，$\epsilon(\boldsymbol{k})$是带能，Σ_t 叫总自能．从(10.2.17)式可以看出，关于受原子无规位形散射的效应讯息由 Σ_t 所反映．我们的问题归结为求 Σ_t

§10.3 虚晶体近似(VCA)

虚晶体是下面三个字的缩写 (*Virtual Crystal Approximation*)

在定义 $G_{av}(E)$的 (10.2.11)式中，原子位形的无规性包含于 $(EI-H)^{-1}$ 的H中，而对于形式 $(EI-H)^{-1}$ 取系综平均是困难的．通常解决这个问题的手续是把H分解为未受微扰部分 (以K表示)和微扰部分$(H-K)$；然后将格林函数以微扰级数展开，其未微扰项取为$(EI-K)^{-1}$;对微扰级数的每一项取系综平均，再求平均后的诸项和.在这种手续中，由于是对 $(H-K)^n$ 形式的项平均，这自然比较容易．当然，如何把H分为上述两部分，那是不唯一的.

将哈密顿量写为

$$H=\bar{H}+W=\bar{H}+(H-\bar{H}) \tag{10.3.1}$$

其中未受微扰部分 $\bar{H}$ 具有完整晶体对称性，而W包含了所有的无序效应．一个初步近似是取

$$\langle W\rangle=0 \tag{10.3.2}$$

即

$$\langle H-\bar{H}\rangle=0$$

由此即有

$$\bar{H}_{ll'}=\langle H_{ll'}\rangle=\bar{E}\delta_{ll'}+\bar{V}_{ll'} \tag{10.3.3}$$

其中用了(10.2.6)式．这叫虚晶体近似 (VCA)．其中虚晶体哈密顿量为$\langle H_{ll'}\rangle$，虚晶体具有材料的平均性质．以 (10.3.3) 式的 $\bar{H}$ 代入方程(10.2.10)式得:

$$\bar{G}_{ll'}=(E-\bar{E}\delta_{ll'}-\bar{V}_{ll'})^{-1} \tag{10.3.4}$$

在虚晶体近似下即:

$$\langle G_{ll'}\rangle \approx \bar{G}_{ll'} \tag{10.3.5}$$

这里完全略去了无序的统计涨落. 无序材料的能谱就取具有(10.3.3)式平均参量的规则晶体的谱. 因此,位势仍具有周期性,仍可用晶体波矢标志态. 这种近似对于求无序系统的带能, 对于求二元无序合金态密度作为浓度函数的内插公式都很有用.

§ 10.4 平均 t 矩阵近似

我们从(10.3.1)式出发,以W为微扰, 格林函数的Dyson 方程可写为

$$\begin{aligned} G &= \bar{G} + \bar{G}WG \\ &= \bar{G} + \bar{G}W\bar{G} + \bar{G}W\bar{G}W\bar{G} + \cdots \end{aligned} \tag{10.4.1}$$

在座位表象中即为:

$$\begin{aligned} G_{ll'} = \bar{G}_{ll'} &+ \sum_{m,m'} \bar{G}_{lm} W_{mm'} \bar{G}_{m'l'} \\ &+ \sum_{\substack{m,m',\\ n,n'}} \bar{G}_{lm} W_{mn} \bar{G}_{nn'} W_{n'm'} \bar{G}_{m'l'} + \cdots, \end{aligned} \tag{10.4.2}$$

对 Dyson 方程如何取系综平均? 作为初步近似, 可将(10.4.1) 式中每一微扰W都以其系综平均值 (10.3.2) 式代替, 这就还原为虚晶体近似(10.3.5)式. 然而, 一个无规哈密顿量的平均格林函数并不等于平均哈密顿量的格林函数 (参见(10.3.3)及(10.3.4)式). 从展开式 (10.4.2) 式来看, 这就是要考虑下列事实: 在图(10-2)中,同一图形内任何格位指标可以重复多次,即: 微扰矩阵元 W_{mn} 在同一乘积中可以出现多次. 这样一来,尽管$\langle W\rangle=0$, 但$\langle W^2\rangle$等不为零. 所以必须改进 VCA 近似.

以下我们略去W中的非对角元. 由(10.3.1)及(10.3.3)式可

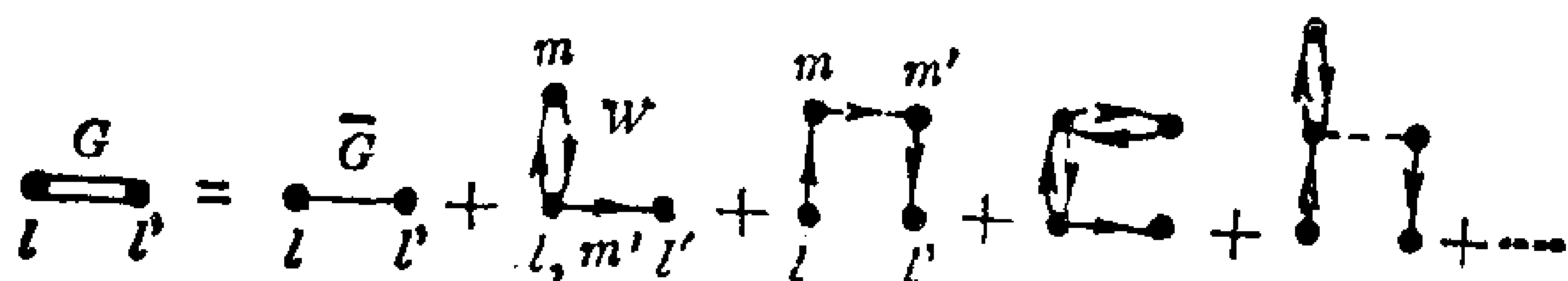


图 10.2　展开示意图

看出这时有:

$$W_{ll'}=(E_l-\bar{E})\delta_{ll'}\equiv W_l\delta_{ll'} \tag{10.4.3}$$

W_l 表示原子态能 E_l 与虚晶体中平均值 $\bar{E}$的偏离. 于是(10.4.2)式化为:

$$G_{ll'}=\bar{G}_{ll'}+\sum_{l''}\bar{G}_{ll''}W_{l''}\bar{G}_{l''l'}+\sum_{l'',l'''}\bar{G}_{ll''}W_{l''}\bar{G}_{l''l'''}W_{l'''}\bar{G}_{l'''l'}+\cdots, \tag{10.4.4}$$

这可图示为:

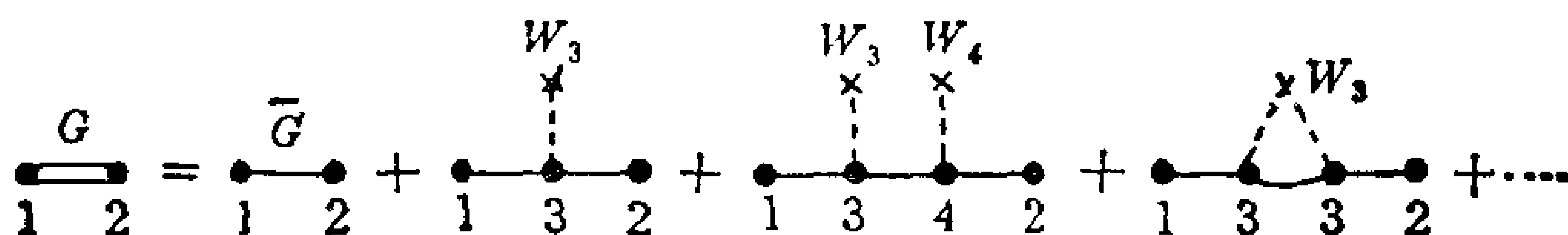


图 10.3　公式(10.4.4)图示

对于来自同一格位的元激发多重散射可用下图表示:

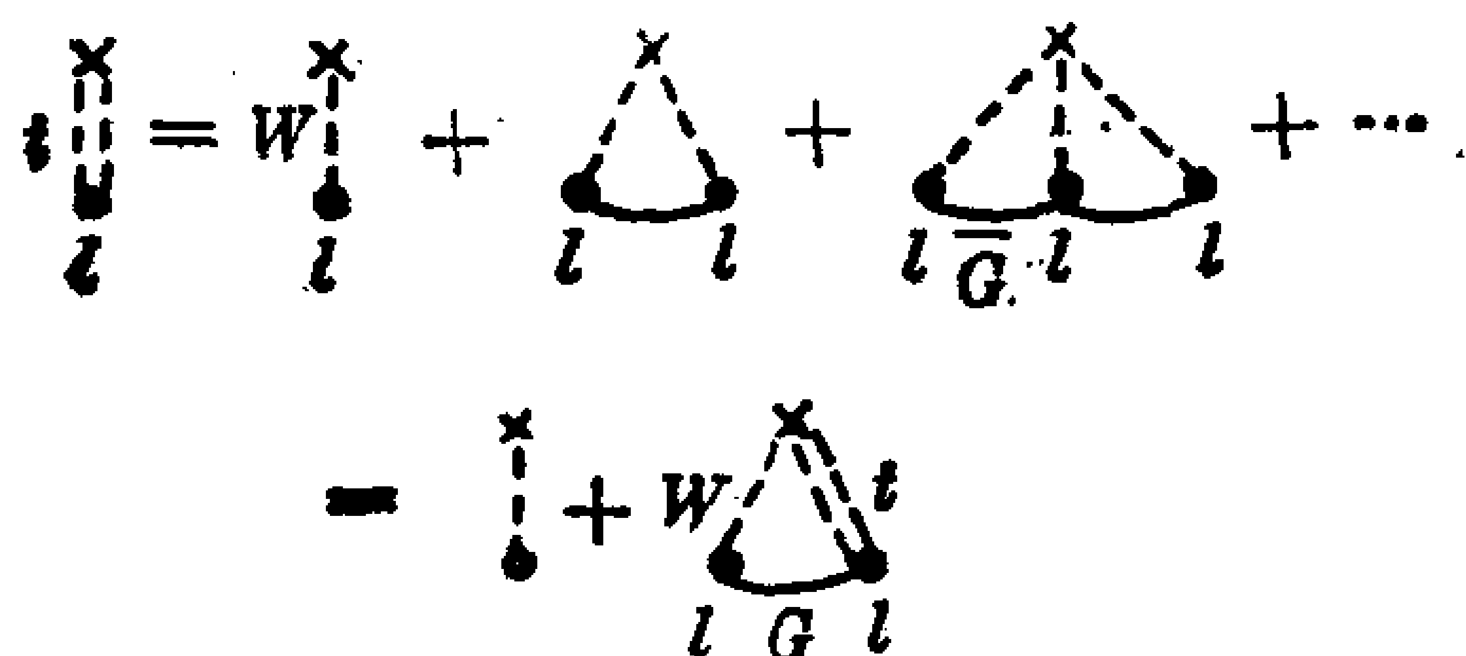


图 10.4　同一格位的元激发多重散射图示

图 10-4 中所引入的座位 t 矩阵(*site t-matrix*)t_l 可写为:

$$\begin{aligned}t_l&\equiv W_l+W_l\bar{G}_{ll}+W_l\bar{G}_{ll}W_l\bar{G}_{ll}W_l+\cdots\\&=W_l+W_l\bar{G}_{ll}t_l=\frac{W_l}{1-W_l\bar{G}_{00}}\end{aligned} \tag{10.4.5}$$

最后一步以 $\overline{G}_{00}$ 代替了 $\overline{G}_{ll}$，因为$\overline{G}_{ll}$ 在每一格位均相等．以 t_l 代入(10.4.4)式即得：

$$G_{ll'}=\overline{G}_{ll'}+\sum_{l''\neq l,l'}\overline{G}_{ll''}t_{l''}\overline{G}_{l''l'}+\sum_{\substack{l''\neq l,l'''\\ l'''\neq l'l',l'}}\overline{G}_{ll''}t_{l''}\overline{G}_{l''l'''}t_{l'''}\overline{G}_{l'''l'}+\cdots,\tag{10.4.6}$$

其中接连的下标不再随即可重复，如下图．

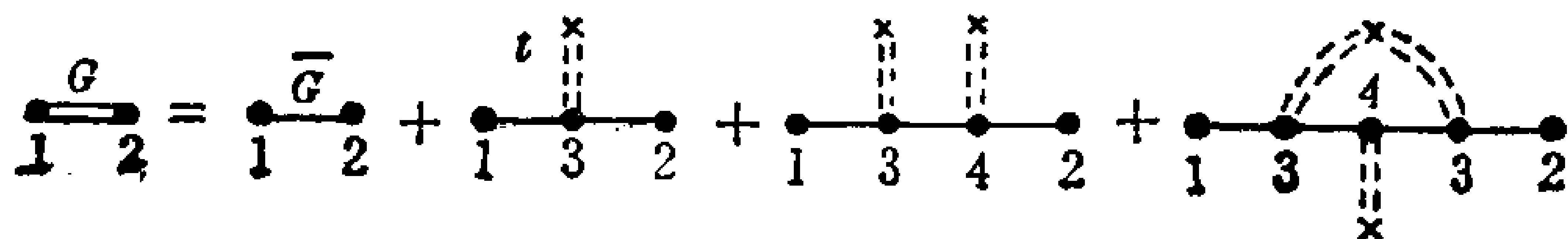


图 10.5

在展开式(10.4.6)式中，t_l 经由(10.4.5) 式和在 l 位上的微扰W_l 联系，它是无规变量．在(10.4.6)式中，在一给定乘积中由同一因子重复所导致的关联依然存在，但是，当取系综平均时，在公式(10.4.6)里，这种关联的比重较之(10.4.4)式显然小多了．从而，若在(10.4.6) 式中对 t 矩阵取平均，以使诸 t_l 退耦合是可取的．这时(10.4.6)式化为

$$G_{ll'}^{\mathrm{ATA}}=\overline{G}_{ll'}+\sum_{l''\neq l,l'}\overline{G}_{ll''}\bar{t}\,\overline{G}_{l''l'}$$

$$+\sum_{\substack{l''\neq l,l'''\\ l'''\neq l'',l'}}\overline{G}_{ll''}\bar{t}\,\overline{G}_{l''l'''}\bar{t}\,\overline{G}_{l'''l'}+\cdots,\tag{10.4.7}$$

这叫平均 t 矩阵近似(ATA)的对 t 矩阵如何取平均？为此，通常引入无规变量W_l的几率分布函数$P(W)$．若$P(W)$为连续函数则叫 Anderson 模型．在二元无序合金中，E_l 只取两个分立值E_A 和 E_B，其相对几率为原子浓度 C_A 和 C_B．一旦确定了 $P(W)$则：

$$\bar{t}=\left\langle\frac{W_l}{1-W_l\overline{G}_{00}}\right\rangle=\int\frac{W}{1-W\overline{G}_{00}}P(W)\mathrm{d}W\tag{10.4.8}$$

注意，$\bar{t}$ 为E的函数．

由于

$$t_l=\frac{W_l}{1-W_l\overline{G}_{00}}$$

所以

$$W_l=\frac{t_l}{1+t_l\overline{G}_{00}} \tag{10.4.9}$$

由此看来,ATA 近似(10.4.7)恰恰相当于在(10.4.4)式中每一格位上的微扰都用同一个量 Σ 来代替. 而由(10.4.9)式可见:

$$\Sigma=\frac{\bar{t}}{1+\bar{t}\overline{G}_{00}} \tag{10.4.10}$$

与(10.3.4)相比,格林函数 $\overline{G}_{ll}$ 中分母多了一个自能(Σ)项. 当采用(10.2.14)式计算态密度时,$\mathrm{Re}\Sigma(E)$ 标志了由于无序引起的能级移动,而 $\mathrm{Im}\Sigma(E)$ 则标志谱宽.

§10.5 相干势近似(CPA)

在§10-3 讲到虚晶体近似时,曾把哈密顿量分为 $\overline{H}$ 及 $H-\overline{H}$ 两部分. 一般地说不一定以 $\overline{H}$ 为未受微扰部分,但总可写

$$H=K+(H-K) \tag{10.5.1}$$

其中 K 为未受微扰部分,它不含无规性, 而把无规项写为 $H-K$. 记未受微扰格林函数为 P:

$$P(Z)\equiv\frac{1}{ZI-K} \tag{10.5.2}$$

Z 为复数能量变量,I 为单位矩阵. 另一方面, 对于平均格林函数可写:

$$G_{\mathrm{av}}(Z)=\frac{1}{ZI-H_{\mathrm{eff}}}$$

适当选择未受微扰哈密顿量 K. 显然,K 越接近 H_{eff} 则微扰效应就越小. 如果 $K=H_{\mathrm{eff}}$ 则对应于此 K 的格林函数 P 就是 G_{av}($\equiv$

$\langle G\rangle$). 这时若对 T 矩阵的定义式

$$G=P+PTP \tag{10.5.3}$$

取平均

$$G_{av}=\langle G\rangle=P+P\langle T\rangle P \tag{10.5.4}$$

可以看出，此时应有

$$\langle T\rangle=0 \tag{10.5.5}$$

因为

$$P=\langle G\rangle=G_{av} \tag{10.5.6}$$

(10.4.10)式此时化为.

$$\Sigma=\frac{\langle T\rangle}{1+\langle T\rangle P} \tag{10.5.7}$$

由(10.5.5)式及(10.5.7)式可以看出，此时有

$$\Sigma=0 \tag{10.5.8}$$

一般地说，对于给定的 K

$$\langle T\rangle=\langle T(K)\rangle \tag{10.5.9}$$

而若令

$$\langle T(K)\rangle=0 \tag{10.5.10}$$

则可将此方程视为一确定 K 之方程，解此方程可得到 K.

然而，一般不可能准确地计算 T 的平均. 于是人们想近似计算 $\langle T\rangle$ 的办法. 遵循 Soven[1] 和 Taylor[2]，人们假设无序系统的谱可用一介质传播量(*medium propagator*) $\tilde{G}(E)$ 所描述，它由下式定义:

$$\tilde{G}(E)=\bar{G}(E-\tilde{\Sigma}(E)) \tag{10.5.11}$$

这是由上节末所讲的经验而想到的，即无序系统的行为可以在每一格位上用自能 $\tilde{\Sigma}(E)$ 项来描述. 称 $\tilde{\Sigma}(E)$ 为相干位势. 因此，第 l 格位上的无规位势 W_l 可表观地改为

$$\tilde{W}_l=W_l-\tilde{\Sigma}(E) \tag{10.5.12}$$

宏观地讲，这是均匀介质的微扰，相应的 t 矩阵为(参见(10.4.5)式)

$$\tilde{t}_l=\frac{\tilde{W}_l}{1-\tilde{W}_l\tilde{G}_{00}} \tag{10.5.13}$$

由于 W_l 为随机变量，所以散射仍随格位不同，但于(10.5.13)式中已用 $\tilde{G}$ 计入了各格位势的总体效应. 与(10.5.10) 式相应的条件为

$$\langle\tilde{t}_l\rangle=\left\langle\frac{\tilde{W}_l}{1-\tilde{W}_l\tilde{G}_{00}}\right\rangle=0 \tag{10.5.14}$$

由(10.5.11)及(10.5.12)式看出，此式是$\tilde{\Sigma}(E)$的隐方程，对它数值求解即可得相干位势作为E的函数. 将解出的$\tilde{\Sigma}(E)$ 代入(10.5.11)式即得介质传播量，从而可计算系统的元激发谱.

在 BRA 模型下(10.5.14)式化为:

$$\frac{C_A(W_A-\tilde{\Sigma})}{1-(W_A-\tilde{\Sigma})\tilde{G}_{00}}+\frac{C_B(W_B-\tilde{\Sigma})}{1-(W_B-\tilde{\Sigma})\tilde{G}_{00}}=0 \tag{10.5.15}$$

(10.5.15)式又可写下列形式

$$\tilde{\Sigma}=\frac{\overline{W}-W_AW_B\tilde{G}_{00}}{1-(W_A+W_B-\tilde{\Sigma})\tilde{G}_{00}} \tag{10.5.16}$$

这形式适宜作迭代. 最低级的解为:

$$\tilde{\Sigma}\approx\overline{W}=C_AW_A+C_BW_B \tag{10.5.17}$$

此即虚晶位势. 以(10.5.17)式迭代入 (10.5.16) 式可得下一级近似:

$$\tilde{\Sigma}(E)\approx\overline{W}+C_AC_B(W_A-W_B)^2\overline{G}_{00}(E) \tag{10.5.18}$$

其中第二项表示由 W_A, W_B偏离平均势 $\overline{W}$ 产生的 VCA 的 Bloch 态间散射. 以上讲的是弱无序极限.

在另一方面，若 W_A-W_B 比虚晶带宽B大得多，则格林函数近似为:

$$\overline{G}_{00}(E-\tilde{\Sigma})\approx(E-\tilde{\Sigma})^{-1} \tag{10.5.19}$$

(参见(10.3.4)及(10.5.11)式). 以此代入(10.5.16)可近似得:

$$\tilde{G}(E)\approx C_A\bar{G}(E-E_A)+C_B\bar{G}(E-E_B) \qquad (10.5.20)$$

其中原子能级 E_A, E_B 现在形成两个 Bloch 带, 带宽为 B, 中心在 E_A, E_B. (10.5.20)式表明: 在强无序情况下, 系统行为有如两个独立的 Bloch 型带. 通常定义:

$$\delta\equiv\frac{|E_A-E_B|}{B} \qquad (10.5.21)$$

为表征无序强度的参量.

(10.5.15)式可写为

$$C_A\tilde{t}_A+C_B\tilde{t}_B=\langle\tilde{t}_l\rangle=0 \qquad (10.5.22)$$

以 $\bar{E}$ 为能量零点, $\tilde{t}_A$ 表示局域在一格位上的散射位势 $E_A-\tilde{\Sigma}$ 所对应的 t 矩阵. $\tilde{t}_B$ 为对 $E_B-\tilde{\Sigma}$ 的对应量. CPA 方程 (10.5.22)式的意义可用图 10-6 说明. 图中空圆圈表示"中心"位置, 在图

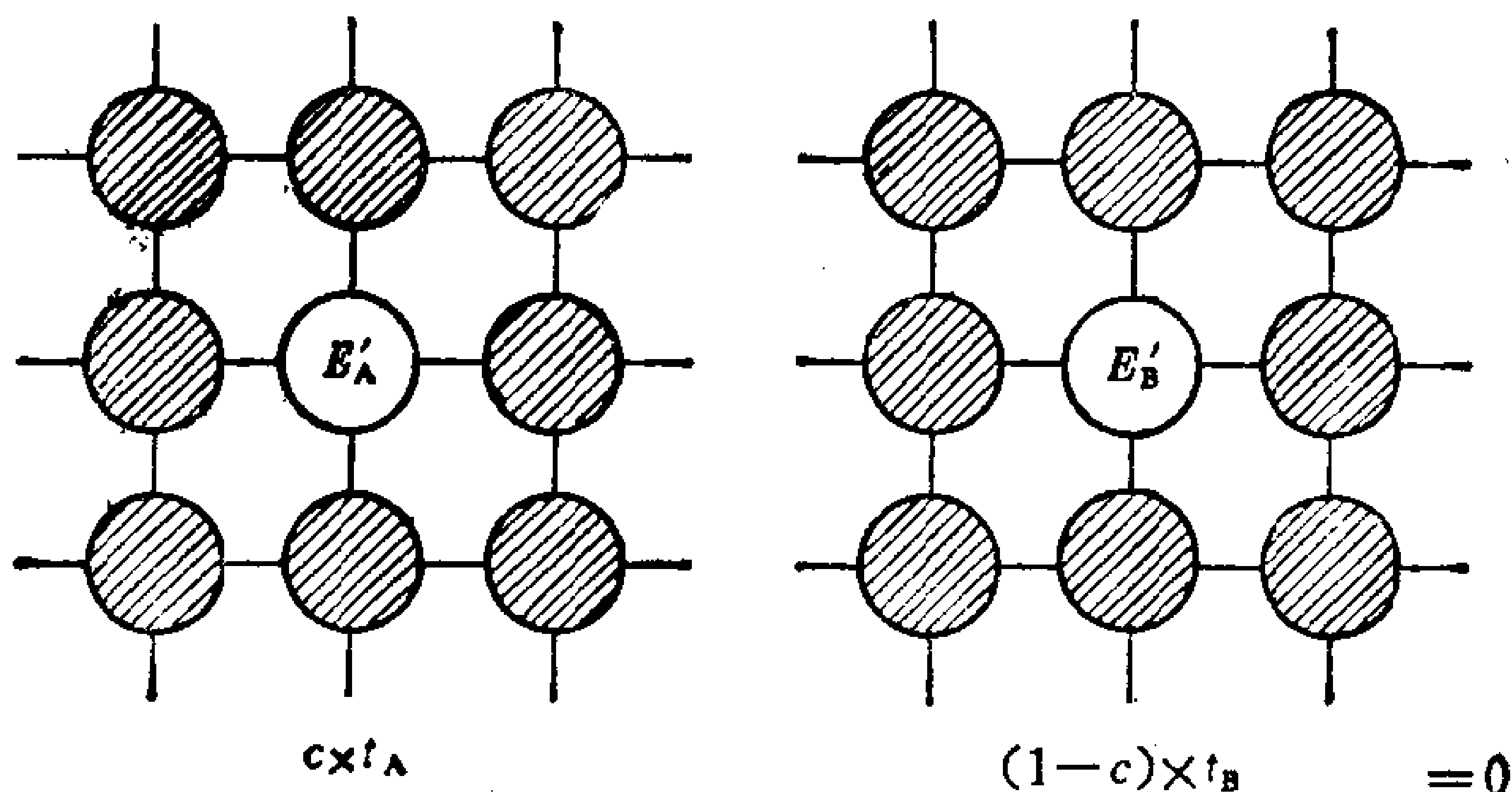


图10.6 CPA 方程图示

10.6的两个"中心"位置上分别为 A'原子(位势 $E'_A\equiv E_A-\tilde{\Sigma}$) 及$B$原子(位势 $E'_B\equiv E_B-\tilde{\Sigma}$)所占据. 图中画有斜线的圆圈则被一赝原子所占据, 其位势为 $\tilde{\Sigma}$. 在"中心"位置发现一个 A' 原子的几率为 C_A. 在"中心" 发现一个 B' 原子的几率为 $C_B=1-C_A$. 上图表示只在"中心"位置上保有无序, 而涨落 E'_A, E'_B 是作用在电子上的附

加散射位势．从无序系统整体而言，当然要求：平均而论，“中心”位置与任何其它位置是等当的．而这就要求，平均而论，由“中心”位置上的附加散射位势所引起的 t 矩阵效应为零．这就是(10.5.22)式的物理含意．CPA 近似的前提是：在所处理对象中，无序或涨落并不是空间局域化的，即，在系统的任何部分均有发现涨落的有限几率．在这情况下，有效介质近似的原则是假设：可用一个假想的无序系统去作近似之平均，而按自洽条件，有效介质的任一部分都应当和“中心”区一致．

CPA 公式可有不同表述，读者可参考文献[3][4][5]．

CPA 方法用来讨论替代式合金超导体很成功[6]．文献[7] 用这方法初步讨论了 Peierls 相变与超导相变之关联，这是探讨高转变温度超导体的一种可能性．

参考文献

[1] P. Soven, *Phys. Rev.* **156** (1967) 809.

[2] D. W. Taylor, *Phys. Rev.* **156** (1967) 1017.

[3] P. L. Leath, *Phys. Rev*, B **2** (1970) 3078.

[4] F. Ducastelle, *J. Phys.*, C **4** (1971) *L*. 75.

[5] T. Matsubara and F. Yonezawa, *Prog. Theor. Phys.*, **37** (1967) 1346.

[6] A. Weinkauf and J. Zittarz, *Solid Stete Commun.* **14** (1974) 365.

[7] 章立源，中国科学，*A* 辑 1982 年 12期，1097.

第十一章　Kondo效应

§11.1　Kondo 效应

一、s-d 交换作用[1]

在本章开始先用较普遍的方法推导出研究Kondo效应所用的 s-d 交换作用哈密顿量. 讨论的对象是稀磁合金体系，其中基体金属是非磁性的，例如铜、金等，含有 10^{-3}—10^{-6} 原子百分比的带有局域磁矩的磁性原子做为杂质，例如铁等. 对一些物理量采用的符号如下，$\boldsymbol{R}_n$是带有局域磁矩的原子的位置，$\phi_L(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_n)$表示贡献局域磁矩的局域电子波函数的空间部分，$\phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})$表示基体金属的传导电子的 Bloch 波函数，$\chi_s(s)$表示单电子自旋函数，$s=\uparrow$或$\downarrow$，$s$ 是自旋变数. 假设只有一个能带，不用能带角标.

稀磁合金中既有传导电子也有局域电子，电子-电子之间的有效库仑相互作用可用场算符 $\hat{\psi}$给出一般的表达式为

$$\frac{1}{2}\int\cdots\int\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r}_1,s_1)\hat{\psi}^+(\boldsymbol{r}_2,s_2)V(\boldsymbol{r}_{12})\psi(\boldsymbol{r}_2,s_2)\Psi(\boldsymbol{r}_1,s_1)\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\mathrm{d}s_1\mathrm{d}s_2, \tag{11.1.1}$$

其中对自旋变数应求和，但为了写法上的方便，形式上写成积分. 场算符$\hat{\psi}$ 的表达式为:

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r},s)=\sum_{\boldsymbol{k}s}\phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})\chi_s(s)c^+_{\boldsymbol{k}s}+\sum_{ns}\phi_L(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{R}_n)\chi_s(s)a_{ns}, \tag{11.1.2}$$

其中 $c_{\boldsymbol{k}s}$, a_{ns} 分别代表传导电子和局域电子的消灭算符. 把(11.1.2)式代入到(11.1.1)中，可以得到十六大项，每一大项又是由许多含有四个产生和消灭算符的项的和组成. 在 Kondo 问题中，传

导电子和局域电子发生散射时，局域电子位置不变，因此我们在(11.1.1)中只关心和上述物理过程有关的一些项. 所有这些项集中写在下式中

$$\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'nss'}[c_{\boldsymbol{k}s}^{+}c_{\boldsymbol{k}'s}a_{ns'}^{+}a_{ns'}\langle\boldsymbol{k}n|\boldsymbol{k}'n\rangle-c_{\boldsymbol{k}s}^{+}c_{\boldsymbol{k}'s'}a_{ns'}^{+}a_{ns}\langle\boldsymbol{k}n|n\boldsymbol{k}'\rangle, \tag{11.1.3}$$

其中$\langle\boldsymbol{k}n|n\boldsymbol{k}'\rangle$是交换积分

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{k}n|n\boldsymbol{k}'\rangle=&\iint \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\phi^*(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}_1)\phi_L^*(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{R}_n)V(\boldsymbol{r}_{12})\\&\times\phi_L(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{R}_n)\phi(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{r}_2).\end{aligned} \tag{11.1.4}$$

以下的计算中不涉及含$\langle\boldsymbol{k}n|\boldsymbol{k}'n\rangle$的项，因此不写出$\langle\boldsymbol{k}n|\boldsymbol{k}'n\rangle$的表达式. 完成 (11.1.3) 式的 对 s 和 s' 的求和之后，改写成如下的形式

$$\begin{aligned}&\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'n}(c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{+}c_{\boldsymbol{k}'\uparrow}+c_{\boldsymbol{k}\downarrow}^{+}c_{\boldsymbol{k}'\downarrow})(a_{n\uparrow}^{+}a_{n\uparrow}+a_{n\downarrow}^{+}a_{n\downarrow})[\langle\boldsymbol{k}n|\boldsymbol{k}'n\rangle\\&-\frac{1}{2}\langle\boldsymbol{k}n|n\boldsymbol{k}'\rangle]-\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'n}\Big[\frac{1}{2}(c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{+}c_{\boldsymbol{k}'\uparrow}-c_{\boldsymbol{k}\downarrow}^{+}c_{\boldsymbol{k}'\downarrow})(a^{+}{}_{n\uparrow}a_{n\uparrow}-a_{n\downarrow}\\&a_{n\downarrow}^{+})+c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{+}c_{\boldsymbol{k}'\downarrow}a_{n\downarrow}^{+}a_{n\uparrow}+c_{\boldsymbol{k}\downarrow}^{+}c_{\boldsymbol{k}'\uparrow}a_{n\uparrow}^{+}a_{n\downarrow}\langle\boldsymbol{k}n|n\boldsymbol{k}'\rangle\Big]\end{aligned} \tag{11.1.5}$$

分析一下(11.1.5)式中的第一个求和式. 已设在 $\boldsymbol{R}_n$ 位置有一个电子占据，则$(a_{n\uparrow}^{+}a_{n\uparrow}+a_{n\downarrow}^{+}a_{n\downarrow})=1$，于是第一个和式是传导电子和局域电子的普通势散射，势函数是$\left[\langle\boldsymbol{k}n|\boldsymbol{k}'n\rangle-\frac{1}{2}\langle\boldsymbol{k}n|n\boldsymbol{k}'\rangle\right]$. 第二个求和式中含有交换积分(11.1.4)式，称为 s-d 交换作用哈密顿量，用 H_{sd}表示，其中之 s 可泛指传导电子（包括 d 带的巡游电子)，d 可泛指局域电子(包括局域的 d 或 f 电子). 为了把(11.1.4)式写成紧凑的形式，做变数变换：令 $\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{R}_n=\boldsymbol{r}'_2$，再把 $\boldsymbol{r}'_2$ 写成$\boldsymbol{r}_2$，令 $\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{R}_n=\boldsymbol{r}'_1$，再把 $\boldsymbol{r}'_1$ 写成 $\boldsymbol{r}_1$，经此变换

$$\phi^*(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}_1)\longrightarrow\phi^*(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{R}_n)=\frac{1}{N^{1/2}}\sum_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}_i}W^*(\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{R}_n$$

$$-\boldsymbol{R}_i)=\frac{1}{N^{1/2}}\sum_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_i+\boldsymbol{R}_n)}W^*(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{R}_i),\qquad(11.1.6)$$

$$\phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}_2)\longrightarrow\phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}_2+\boldsymbol{R}_n)=\frac{1}{N^{1/2}}\sum_j \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_j+\boldsymbol{R}_n)}W(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{R}_j),$$

其中 $W(\boldsymbol{r})$是 Wannier 函数,N 是格点总数，把(11.1.6)代入到(11.1.4)中,得到

$$\langle\boldsymbol{k}n|n\boldsymbol{k}'\rangle=\frac{1}{N}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'-\mathrm{K})\cdot\boldsymbol{R}_n}\sum_{ij}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_j-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i)}\cdot$$

$$\iint W^*(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{R}_i)\phi_L^*(\boldsymbol{r}_2)V(\boldsymbol{r}_{12})\phi_L(\boldsymbol{r}_1)W(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{R}_j)\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2$$

$$=:\frac{1}{N}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{R}_n}J(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')=\frac{1}{N}J(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'),\qquad(11.1.7)$$

其中 $J(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$的定义由第二个等式定义，第三个等式是假设只有一个磁性原子,而且放在坐标原点，$\boldsymbol{R}_n=0$. 考虑到费密面附近的电子起主要作用,可以取$J(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$在费密面附近不为零,是常数,即

$$\langle\boldsymbol{k}n|n\boldsymbol{k}'\rangle=\begin{cases}\frac{1}{N}J, & |\varepsilon(\boldsymbol{k})-\varepsilon_{\mathrm{F}}|<D,\ |\varepsilon(\boldsymbol{k}')-\varepsilon_{\mathrm{F}}|<D\\ 0 & ,\text{其它}\end{cases}\qquad(11.1.8)$$

可以证明在 n 位置的自旋算符的分量及自旋升、降算符用局域电子的产生、消灭算符表示为

$$\hat{S}_{nz}=\frac{1}{2}(a_{n\uparrow}^+a_{n\uparrow}-a_{n\downarrow}^+a_{n\downarrow}),$$

$$\hat{S}_{nx}=\frac{1}{2}(a_{n\uparrow}^+a_{n\downarrow}+a_{n\downarrow}^+a_{n\uparrow}),$$

$$\hat{S}_{ny}=-\frac{\mathrm{i}}{2}(a_{n\uparrow}^+a_{n\downarrow}-a_{n\downarrow}^-a_{n\uparrow}),\qquad(11.1.9)$$

$$\hat{S}_{n+}=\hat{S}_{nx}+\mathrm{i}\hat{S}_{ny}=a_{n\uparrow}^+a_{n\downarrow},$$

$$\hat{S}_{n-}=\hat{S}_{nx}-\mathrm{i}\hat{S}_{ny}=a_{n\downarrow}^+a_{n\uparrow}.$$

例如证明其中之 $\hat{S}_{nx}$ 的表达式.

$$
\begin{aligned}
\hat{S}_{nx} &= \sum_{\sigma\sigma'} \langle n\sigma | \hat{S}_x | n\sigma' \rangle a_{n\sigma}^{+} a_{n\sigma'} \\
&= \sum_{\sigma\sigma'} \chi_{\sigma}^{+} (\hat{S}_x)_{\sigma\sigma'} \chi_{\sigma'}\, a_{n\sigma}^{+} a_{n\sigma'} \\
&= (1 \quad 0) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} a_{n\uparrow}^{+} a_{n\downarrow} \\
&+ (0 \quad 1) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} a_{n\downarrow}^{+} a_{n\uparrow} \\
&= \frac{1}{2} a_{n\uparrow}^{+} a_{n\downarrow} + \frac{1}{2} a_{n\uparrow}^{+} a_{n\uparrow}.
\end{aligned}
$$

把(11.1.7)、(11.1.8)、(11.1.9)三式代入到由(11.1.5)式给出的 $\hat{H}_{sd}$ 的表达式中，得出

$$
\hat{H}_{sd} = -\frac{1}{2N} \sum_{kk'n} J \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{R}_n} [(c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{+} c_{\boldsymbol{k}'\uparrow} - c_{\boldsymbol{k}\downarrow}^{+} c_{\boldsymbol{k}'\downarrow}) \hat{S}_{nz} + c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{+} c_{\boldsymbol{k}'\downarrow} \hat{S}_{n-} + C_{\boldsymbol{k}\downarrow}^{+} c_{\boldsymbol{k}'\uparrow} \hat{S}_{n+}]. \qquad (11.1.10)
$$

如果只有一个磁性原子，放在坐标原点，则 $\hat{H}_{sd}$ 化为

$$
\hat{H}_{sd} = -\frac{1}{2^N} \sum_{kk'} J [(c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{+} c_{\boldsymbol{k}'\uparrow} - c_{\boldsymbol{k}\downarrow}^{+} c_{\boldsymbol{k}'\downarrow}) \hat{S}_{nz} + c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{+} c_{\boldsymbol{k}'\downarrow} \hat{S}_{n-} + c_{\boldsymbol{k}\downarrow}^{+} c_{\boldsymbol{k}'\uparrow} \hat{S}_{n+}]. \qquad (11.1.11)
$$

有的书中给出的一个磁性原子的 $\hat{H}_{sd}$ 的表达式为[2]

$$
\hat{H}_{sd} = -Jf(\boldsymbol{r}) \hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}} \qquad (11.1.12)
$$

其中 $\hat{\boldsymbol{S}}$ 是局域磁矩决定的自旋矢量算符，$\boldsymbol{s}$ 是传导电子的自旋矢量算符. 可以证明对接触作用($f(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r})$)及只有一个局域电子贡献局域磁矩的条件下，(11.1.12)的二次量子化形式正是 (11.1.11).

二、稀磁合金电阻极小理论

1. 实验现象

由(11.1.11)式给出的哈密顿量 $\hat{H}_{sd}$ 的突出特点是允许传导电子和局域电子之间的自旋倒向散射过程．这是一个新的散射自由度，将使散射截面等物理量变大，从而导致电阻增加．特别是在低温下电声子散射电阻减小，但是自旋倒向散射过程由于低温下热运动的干扰减弱，反而变强，使这部份电阻随温度下降而上升．电声子散射电阻和自旋倒向电阻两个因素互相制约的结果，使得在电阻温度关系曲线上出现极小值．1964年 Kondo 用(11.1.11)形式的哈密顿量解释了早在30—40年代就已经在实验中多次发现的电阻极小现象[1]．典型的实验曲线如图11.1所示．由图中看出随着温度的降低，电阻既不趋于零，也不减小到剩余电阻常数值，而是对数增加．稀磁合金中的电阻极小现象称为 Kondo 效应．

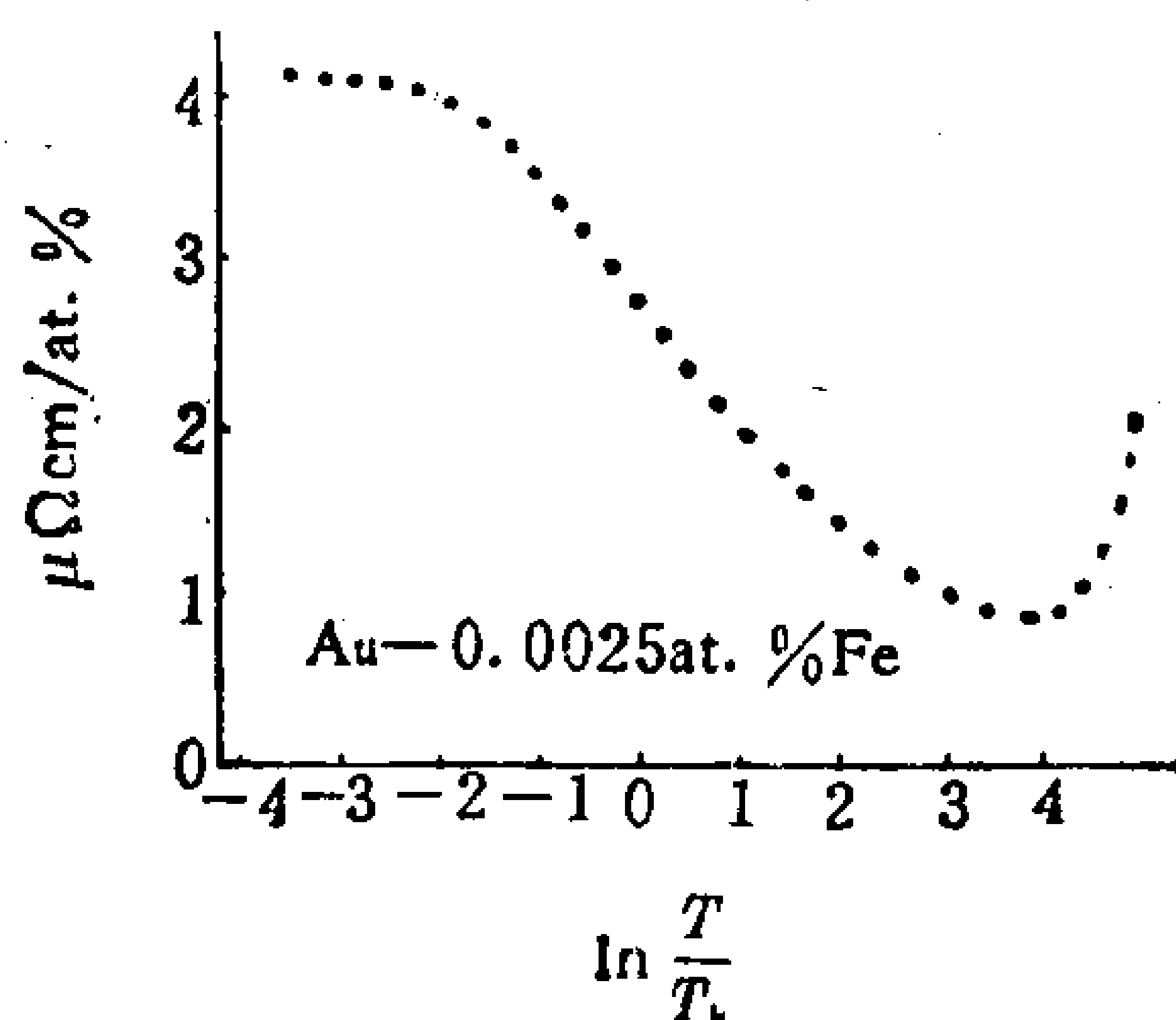


图 11.1　金铁稀磁合金电阻极小值

2. 赝Fermi子哈密顿量

Kondo 当初推出电阻极小值的步骤是由 $\hat{H}_{sd}$ 求出 t 矩阵的矩阵元，再求出跃迁几率，进而求出弛豫时间，最后求出电阻．所用的方法较繁琐，特别是很难求出高级过程的影响．在这一节讲述较好的用格林函数处理稀磁合金电阻的方法，下面两节讲述重整化群方法及其在 Kondo 效应的应用．

$\hat{H}_{sd}$ 哈密顿量(11.1.11)可以用局域电子的产生、消灭算符表

达为

$$\hat{H}_{sd}=-\frac{J}{2N}\sum_{\substack{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\\ \alpha\alpha'\beta\beta'}}(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\alpha}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta'\beta})c^{+}_{\boldsymbol{k}'\alpha'}c_{\boldsymbol{k}\alpha}d^{+}_{\beta'}d_{\beta}, \qquad (11.1.13)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 和 $2\boldsymbol{S}$ 是 Pauli 自旋矩阵. d^{+} 和 d 是局域电子的产生、消灭算符[3]. 在文献[3]及现在的许多文献中局域电子称为赝费密子. 稀磁合金体系的总哈密顿量为[4]

$$\hat{H}=\sum_{\boldsymbol{k}\alpha}\epsilon_{\boldsymbol{k}}c^{+}_{\boldsymbol{k}\alpha}c_{\boldsymbol{k}\alpha}+\sum_{\beta}\epsilon_{d}d^{+}_{\beta}d_{\beta}-\frac{J}{2N}\sum_{\substack{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\\ \alpha\alpha'\beta\beta'}}(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\alpha}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta'\beta})c^{+}_{\boldsymbol{k}'\alpha'}c_{\boldsymbol{k}\alpha}d^{+}_{\beta'}d_{\beta}, \qquad (11.1.13)'$$

其中$\epsilon_{\boldsymbol{k}}$, ϵ_{d} 是相对费密面的裸传导电子,裸赝费密子能量. 赝费密子算符满足费密子型对易关系. 自由赝费密子在某一位置的多体态有四个: $|0\uparrow,0\downarrow\rangle$、$|1\uparrow,0\downarrow\rangle$、$|0\uparrow,1\downarrow\rangle$、$|1\uparrow,1\downarrow\rangle$,相应的能量分别是 0, ϵ_{d}、ϵ_{d}、$\alpha\epsilon_{d}$. 用这四个态求平均赝费密子数,赝费密子自旋的根均方值,赝费密子数平均涨落分别为:

$$\langle\hat{n}_{d\uparrow}\rangle=\langle\hat{n}_{d\downarrow}\rangle=\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\epsilon_{d}}+1}, \qquad (11.1.14)$$

$$\langle s^{2}\rangle=\frac{\sqrt{3}}{2}\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_{d}/2}\frac{1}{\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_{d}}+1}, \qquad (11.1.15)$$

$$[\langle\hat{N}_{d}^{2}\rangle-\langle\hat{N}_{d}\rangle^{2}]=\sqrt{2}\,\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_{d}/2}\cdot\frac{1}{\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_{d}}+1}. \qquad (11.1.16)$$

其中 $\beta=1/k_{\mathrm{B}}T$. Kondo 使用的哈密顿量是(11.1.11)式, 这是严格地只有一个自旋为 1/2 的局域电子哈密顿量, 引入赝费密子算符表达的 $\hat{H}_{sd}$ 则与(11.1.11)不同,前者还包括零个和两个局域电子的非物理实际的态. 在计算中消除这两个非物理实际的态的影响的方法是取 $\varepsilon_{d}=0$,由(11.2.3)式可知平均局域电子数是一, 从平均的意义上符合物理实际, 消除非物理态的影响是引入归一化因子"2",即自能和电阻等物理量的计算结果乘以 2, 则和(11.1.

11）结果相同[3,4]．使用赝费密子哈密顿量(11.1.14)的优点是可以用 Wick 定理，从而有 Feyman 图展开，而(11.1.11)式中的自旋算符不满足 费密型或玻色型对易关系，因此不能应用 Wick 定理，也就不能做 Feyman-Dyson 展开了．(11.1.14)只含一个孤立的磁性杂质原子自旋，位于坐标原点．一个实际的稀磁合金体系的磁性杂质浓度是 c，共有 cN个磁性原子，因此使用(11.1.14)的结果应乘以 cN．

3．s-d 顶角部分

用裸梯形图近似计算的 s-d 顶角部分，传导电子不可约自能及电阻等都在 Kondo 温度处发散．用 $T>0$K 微扰论传导电子格林函数为

$$\mathscr{G}_{\alpha\alpha'}(\boldsymbol{k}\tau,\boldsymbol{k}'\tau')=-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^{\beta}\cdots\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau_1\cdots\mathrm{d}\tau_n$$
$$\langle T_\tau[\hat{H}_{sd}(\tau_1)\cdots\hat{H}_{sd}(\tau_n)c^{-}_{\boldsymbol{k}\alpha}(\tau)c_{\boldsymbol{k}'\alpha'}(\tau')]\rangle_c,\qquad(11.1.17)$$

从 $\hat{H}_{sd}$ 的形式可以得出如下的图解规则：相互作用顶点和两条虚线、两条实线相联，表示$\frac{J}{2N}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\alpha}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta'\beta}$；虚线表示零级赝费密子格林函数，$\frac{-1}{\mathrm{i}\omega_n-\epsilon_d}$；实线表示零级传导电子格林函数，$\frac{-1}{\mathrm{i}\omega_n-\epsilon_{\boldsymbol{k}}}$；对内线独立动量、自旋求和；对内线独立频率求和$T\sum\limits_{\omega}$；乘以$(-1)^F$，$F$ 是费密子闭合环数目．s-d 相互作用用顶点表示是一种简化的形式，有时为了清楚也用波纹线表示，如图 11.2．

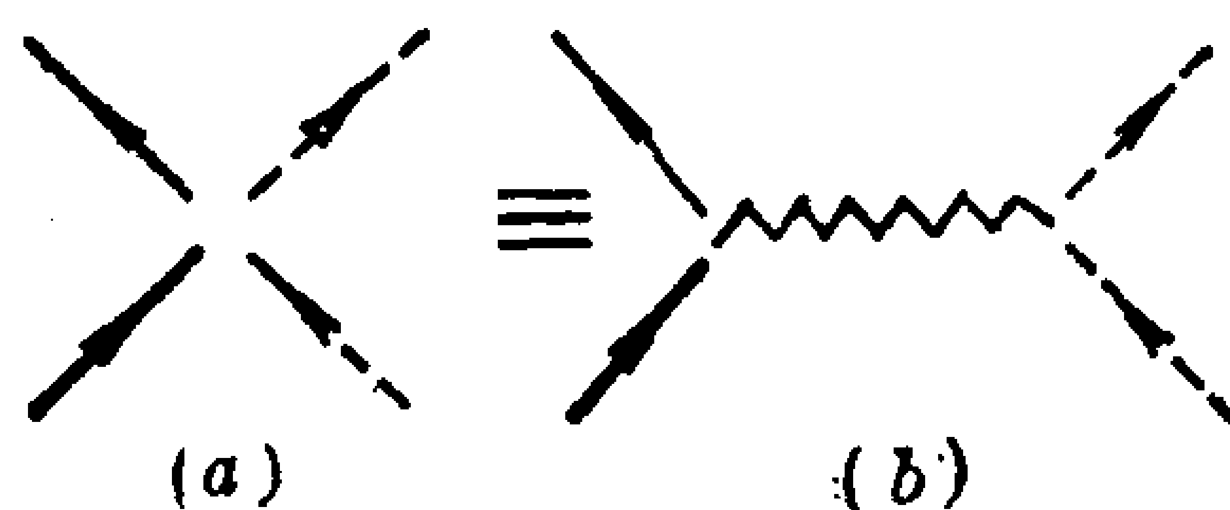


图 11.2　(a) s-d 作用的简化形式　(b) s-d 作用的一般形式

在裸形图近似下，s-d 顶角部份的微扰展开是图 11-3(a)所表示的粒子-粒子部份 Γ 和粒子-空穴部分 γ 之和．这两个量的积分方程的 Feyman 图表示如图 11-3 的(b)和(c)．先分析粒子-粒子顶角部分．

$$\Gamma_{\alpha\beta\alpha''\beta''}(\boldsymbol{q},\omega_n;\boldsymbol{p},\omega_i;\omega_m)=\frac{J}{2N}(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha''}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta''})+\frac{J}{2N}T\sum_{l\omega_s\alpha'\beta'}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha'}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta'\beta})\mathscr{G}_0(\boldsymbol{l},-\omega_s)\mathscr{G}_0^p\Gamma_{\alpha'\beta'\alpha''\beta''}(\boldsymbol{l},\omega_s;\boldsymbol{p},\omega_i;\omega_m),$$

$$(11.1.18)$$

其中$\mathscr{G}_0(\boldsymbol{l},\omega_s)=\dfrac{-1}{\mathrm{i}\omega_s-\epsilon_l}$，$\mathscr{G}_0^p(\omega_s+\omega_m)=\dfrac{-1}{\mathrm{i}(\omega_s+\omega_m)-\epsilon_d}$．把$\Gamma$写

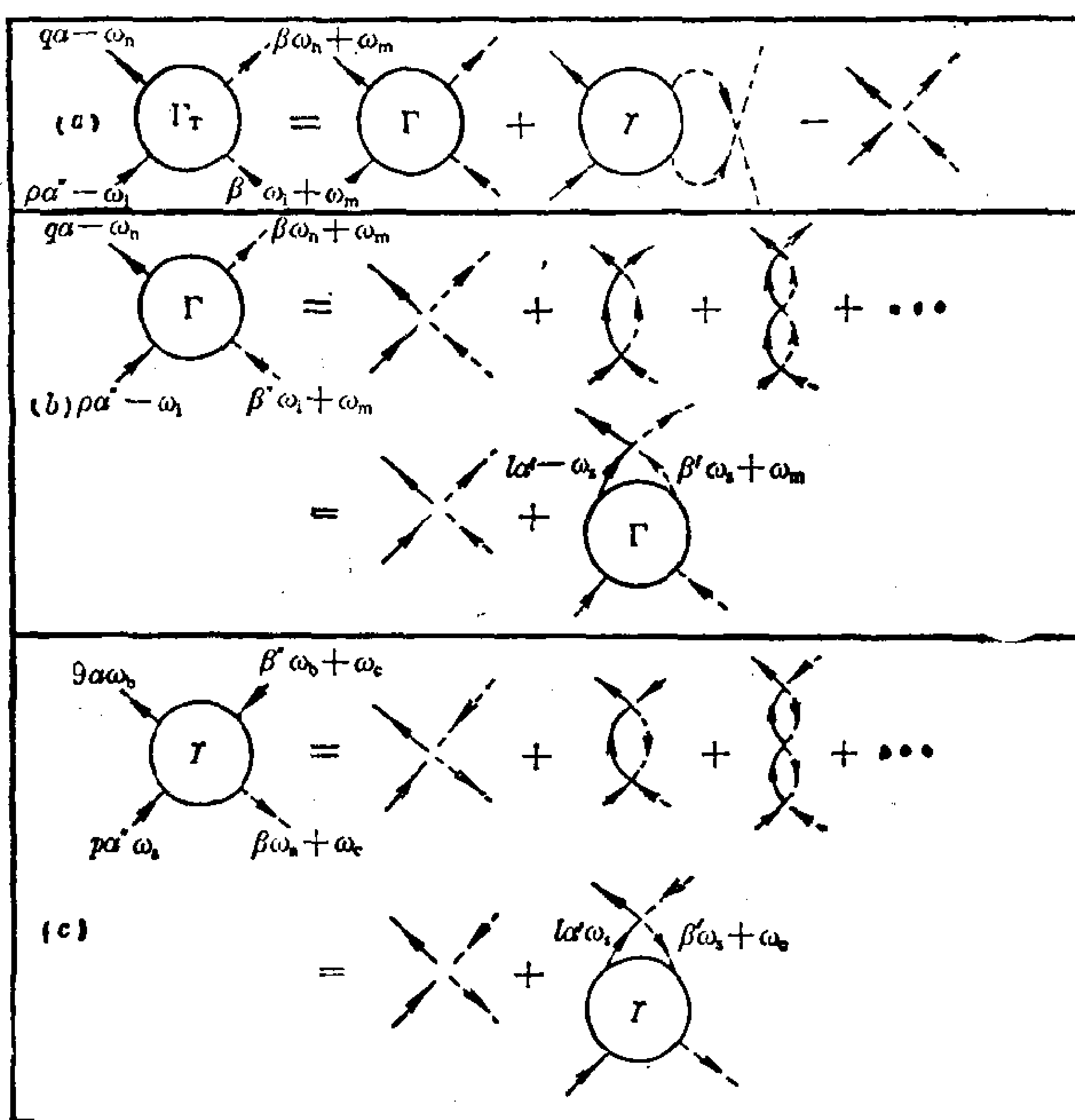


图 11.3　梯形图近似下的 s-d 顶角部分

(a) 用粒子-粒子顶角部分及粒子-空穴顶角部分表达总顶角部分

(b) 和(c)分别表示粒子-粒子顶角部分Γ及粒子-空穴顶角部分 γ.

成标量及矢量之和的形式

$$\Gamma_{\alpha\beta\alpha''\beta''}=\Gamma^{0}\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}+\Gamma^{1}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha''}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta''}. \qquad (11.1.19)$$

把(11.1.19)式代入到(11.1.18)式中及应用下述恒等式

$$\sum_{\alpha'\beta'}(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha'}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta'})(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\alpha''}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta'\beta''})=\frac{3}{4}\delta_{\alpha\alpha''}\delta_{\beta\beta''}-\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha''}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta''}, \qquad (11.1.20)$$

得出两个耦合方程

$$\Gamma^{0}(\boldsymbol{q},\omega_n;\boldsymbol{p},\omega_i;\omega_i;\omega_m)=\frac{3J}{8N\beta}\sum_{l\omega'_s}\mathscr{G}_0(\boldsymbol{l}',-\omega'_s)\mathscr{G}_0^{p}(\omega'_s+\omega_m)\times\Gamma^{1}(\boldsymbol{l}',\omega'_s;\boldsymbol{p},\omega_i;\omega_m), \qquad (11.1.21)$$

$$\Gamma^{1}(\boldsymbol{q},\omega_n;\boldsymbol{p},\omega_m)=\frac{J}{2N}+\frac{J}{2N\beta}\sum_{l\omega_s}\Gamma^{0}(\boldsymbol{l},\omega_s;\boldsymbol{p},\omega_i;\omega_n)\mathscr{G}_0(\boldsymbol{l},-\omega_s)\times\mathscr{G}_0^{p}(\omega_s+\omega_m)-\frac{J}{2N\beta}\sum_{l\omega_s}\Gamma^{1}(\boldsymbol{l},\omega_s;\boldsymbol{p},\omega_i;\omega_m)\mathscr{G}_0(\boldsymbol{l},-\omega_s)\times\mathscr{G}_0^{p}(\omega_s+\omega_m) \qquad (11.1.22)$$

定义

$$K_0(\omega_n)=\frac{J}{2N}\sum_{l}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_s}\mathscr{G}_0(\boldsymbol{l},-\omega_s)\mathscr{G}_0^{p}(\omega_s+\omega_m) \qquad (11.1.23)$$

注意到Γ^1和第一对变量 $\boldsymbol{q},\omega_n$ 无关，则由(11.1.21)式得出

$$\Gamma^{0}(\omega_m)=\frac{3}{4}K_0\Gamma^{1}(\omega_m). \qquad (11.1.24)$$

把(11.1.24)代入(11.1.22)式，得出

$$\Gamma^{1}(\omega_m)=\frac{J/2N}{1+K_0-\frac{3}{4}K_0^2}. \qquad (11.1.25)$$

Kondo 于 1964 年的工作相当于取 Γ 和 γ 的第一和第二级近似，即对 Γ^1 和Γ^0 取

$$\Gamma^{1}=\frac{J}{2N}(1-K_0);\quad \Gamma^{0}=\frac{3}{4}\frac{J}{2N}K_0(1-K_0). \qquad (11.1.26)$$

$K_0(\omega_m)$只是图 11-3 的一个 s-d 对泡图，其中的对频率求和可以应用第二章的求和公式，即

$$\frac{1}{\beta}\sum_{s=-\infty}^{+\infty} F(\mathrm{i}\omega_s)=F(\omega)f(\omega)\text{在}F(\omega)\text{的极点的留数之和,} \tag{11.1.27}$$

其中 $f(\omega)$是费密分布

$$f(\omega)=\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\omega}+1}=\frac{1}{2}\left[1-\tanh\ \frac{1}{2}\beta\omega\right] \tag{11.1.28}$$

注意(11.1.27)式要求 $F(\omega)$应比 $1/\omega$ 更快地在 $\omega\to\infty$ 时趋于零．把$\mathscr{G}_0$和$\mathscr{G}_0^d$的表达式代入(11.1.23)式，可知$F(\omega)$是

$$F(\omega)=\frac{1}{\omega+\epsilon_l}\,\frac{1}{\omega+\mathrm{i}\omega_m-\epsilon_d}. \tag{11.1.29}$$

因此(11.1.27)式成为

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_s}F(\mathrm{i}\omega_s)=\frac{f(\epsilon_d-\mathrm{i}\omega_m)}{\epsilon_l+\epsilon_d-\mathrm{i}\omega_m}-\frac{f(-\epsilon_l)}{\epsilon_q+\epsilon_d-\mathrm{i}\omega_m} \tag{11.1.30}$$

由于 ω_s 和 $\omega_s+\omega_m$ 都和奇数成正比，所以 ω_m 和偶数成正比，因而

$$f(\epsilon_d-\mathrm{i}\omega_m)=f(\epsilon_d). \tag{11.1.31}$$

可以求出

$$K_0(\omega)=\frac{J}{4N}\sum_l\frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\epsilon_l\right)+\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\epsilon_d\right)}{\epsilon_l+\epsilon_d-\mathrm{i}\omega}$$

$$=\frac{J\rho}{4N}\int_{-D}^{+D}\mathrm{d}\epsilon\,\frac{\tanh\frac{1}{2}\beta\epsilon}{\epsilon-\mathrm{i}\omega}. \tag{11.1.32}$$

推导(11.1.32)式过程中用连续变数ω代替ω_m，假设态密度在$2D$带宽中是常数，取 $\epsilon_d=0$．

由于物理的散射振幅在实时间区域，相应地付立叶变换之后是实频率，所以应把 $K_0(\omega)$ 解析延拓到实轴之上，实轴上有割缝．

在(11.1.32)式中作代换 $i\omega\to x+i0^+$ 后有

$$K_0(x+i0^+)=\frac{J\rho}{4N}\mathrm{P}\int_{-D}^{+D}\mathrm{d}\epsilon\frac{\tanh\frac{1}{2}\beta\epsilon}{\epsilon-x}+i\frac{J\pi\rho}{4N}\tanh\frac{\beta x}{2}$$

$$\approx\frac{J\rho}{4N}\ln\left[\frac{D^2}{x^2+(2T)^2}\right]+i\frac{J\pi\rho}{4N}\tanh\left(\frac{x}{2T}\right),\qquad(11.1.33)$$

最后一步近似用到 $D\gg x, 2T$; P 代表主值积分. (11.1.25)式的分母为 0 时, Γ^1 发散, 这时

$$K_0=-\frac{2}{3}+i0^+, \alpha+i0^+\qquad(11.1.34)$$

按照(11.1.34)式, $K_0(x+i0^+)$的虚部在 $x=0$ 时为 0, 因此Γ^1及Γ发散的条件是

$$K_0(0+i0^+)=\frac{J\rho}{4N}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\epsilon\frac{\tanh\frac{1}{2}\beta\epsilon}{\epsilon}=-\frac{2}{3}\text{或}\,2\qquad(11.1.35)$$

用(11.1.34)式的近似公式, 得出

$$K_0(0+i0^+)\approx\frac{J\rho}{2N}\ln\frac{D}{2T}.\qquad(11.1.36)$$

把(11.1.36)式代入(11.1.35)式, 知Γ的发散温度是

$$T_{k_1}=\frac{1}{2}D\exp(-4N/3|J|\rho),\ \text{当}\ J<0,\qquad(11.1.37)$$

$$T_{k_2}=\frac{1}{2}D\exp(-4N/J\rho),\ \text{当}\ J>0,\qquad(11.1.38)$$

现在讨论图 11-3 的粒子-空穴顶角部分 γ. 和计算Γ的方法大体相同, 只有两点不同. 一是自旋求和要用恒等式

$$\sum_{\alpha'\beta'}(\sigma_{\alpha'\alpha''}\cdot S_{\beta\beta'})\ (\sigma_{\alpha\alpha'}\cdot S_{\beta'\beta''})=\frac{3}{4}\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}+\sigma_{\alpha\alpha''}\cdot S_{\beta\beta''}$$

(11.1.39)

二是在(11.1.27)—(11.1.30)中要做代换 $-\omega_s\to\omega_s$, 出现了"-1"因子, 即

$$\gamma^1(\omega_c)=\Gamma^1(-\omega_c), \tag{11.1.40}$$

$$\gamma^0(\omega_c)=-\Gamma^0(-\omega_c). \tag{11.1.41}$$

图 11-3 的总顶角部分 Γ_T 在裸梯形近似下为

$$\Gamma_T=\Gamma_{\alpha\beta\alpha''\beta''}(\omega_m)+\gamma_{\alpha\beta\alpha''\beta''}(\omega_m+\omega_n+\omega_l)-\frac{J}{2N}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha''}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta''} \tag{11.1.42}$$

4. 传导电子自能和电阻

传导电子不可约自然 Σ 可以按图 11.4 由顶角部分求 出来.

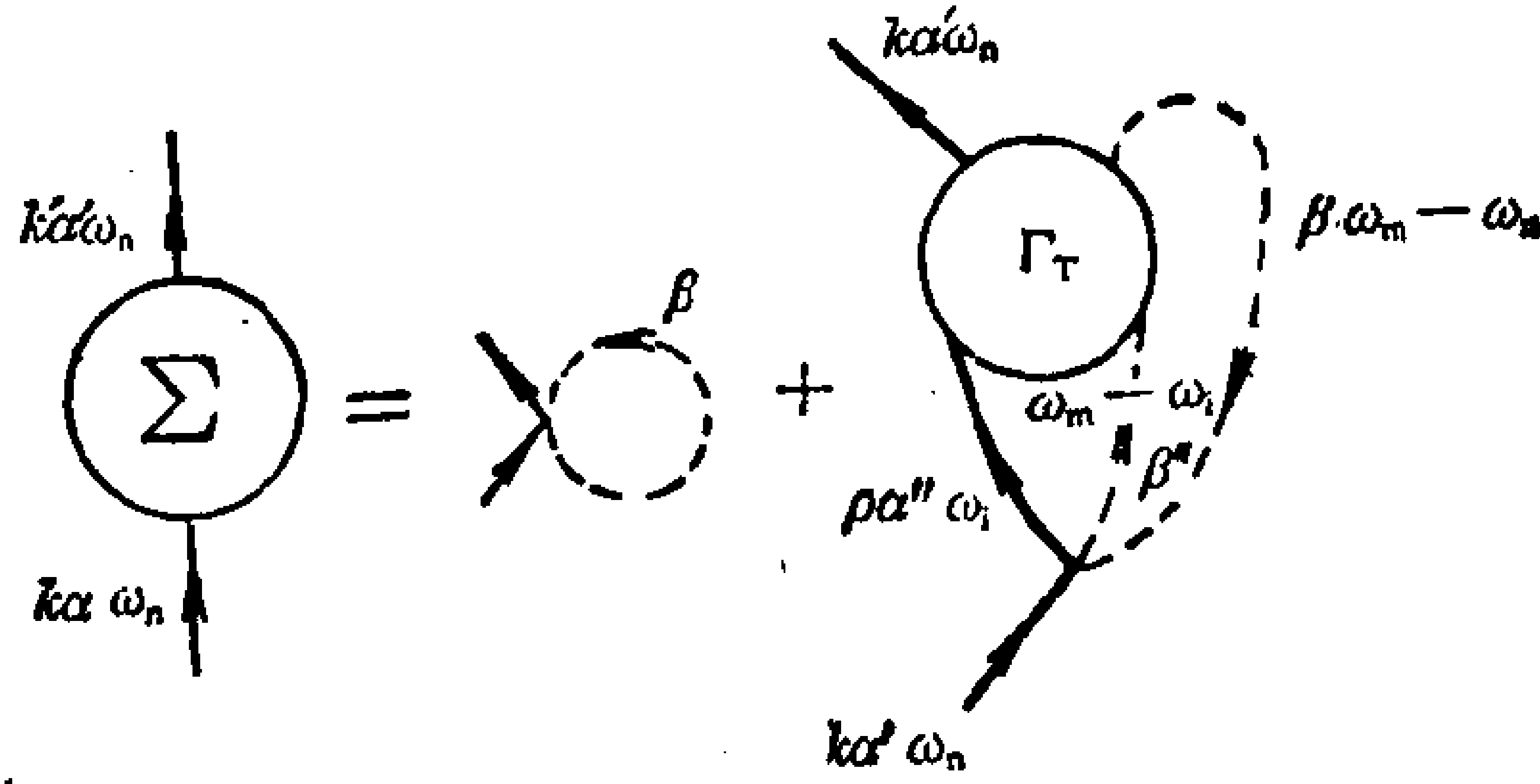


图 11.4　用总顶角部分表达的传导电子不可约自能

在图 11-4 中开始之入射电子线的自旋是 α, 最后的出射电子线也是 α',这是由(11.1.19),(11.1.40),(11.1.41)和 (11.1.42) 各式决定的. Γ_T也可写成矢量和标量两部分之和, 于是图 11-4 的第二项的自旋求和部分为

$$\sum_{\beta\beta''\alpha''}(\Gamma_T^0\delta_{\alpha'\alpha''}\delta_{\beta\beta''}+\Gamma_T^1\boldsymbol{\sigma}_{\alpha'\alpha''}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta''})(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha''\alpha}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta''\beta})=\frac{3}{2}\Gamma^1{}_T\delta_{\alpha'\alpha} \tag{11.1.43}$$

把图 11-4写成表达式,并且完成自旋求和,则有

$$\Sigma(\omega_n)=\frac{3}{2\beta}\sum_{\omega_m}\frac{K_0(\omega_m)\Gamma_T^1(\omega_m)}{\mathrm{i}\omega_n-\mathrm{i}\omega_m}, \tag{11.1.44}$$

其中的$\Gamma^1{}_T(\omega_m)$ 可由(11.1.41)和(11.1.24)代入(11.1.43)式得出,化简之后代入(11.1.44)式,设 $\alpha=\alpha'$, 得出

$$\Sigma(\omega_n)=\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_m}\frac{4\Gamma^0(\omega_m)-\frac{3J}{4N}K_0(\omega_m)}{\mathrm{i}\omega_n-\mathrm{i}\omega_m} \tag{11.1.45}$$

为了做出上式的频率求和，把上式的分子用谱的形式表出

$$4\Gamma^0(\omega_m)-\frac{3J}{4N}K_0(\omega_m)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\,\frac{Q(\omega)}{\mathrm{i}\omega_m-\omega}, \tag{11.1.46}$$

其中谱密度 $Q(\omega)$ 是

$$Q(\omega)=-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left[4\Gamma^0(\omega+\mathrm{i}0^+)-\frac{3J}{4N}K_0(\omega+\mathrm{i}0^+)\right]. \tag{11.1.47}$$

把(11.1.47)式代入到(11.1.46)式中，有

$$\Sigma(\omega_n)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\omega Q(\omega)\,\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{(\mathrm{i}\omega_n-\mathrm{i}\omega_m)(\mathrm{i}\omega_m-\omega)}. \tag{11.1.48}$$

由于图 11-4中的ω_m和偶数成正比，泊松求和公式成为

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}F(\mathrm{i}\omega_m)=-F(\omega)\quad g(\omega) \tag{11.1.49}$$

在$F(\omega)$的极点的留数之和，其中 $g(\omega)$是玻色分布

$$g(\omega)=\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\omega}-1}. \tag{11.1.50}$$

用公式(11.1.49)完成(11.1.48)式的对频率求和，得出

$$\Sigma(\omega_n)=-\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\omega Q(\omega)\,\frac{g(\omega)+\frac{1}{2}}{\mathrm{i}\omega_n-\omega}. \tag{11.1.51}$$

在费密面处计算的不可约自能的虚部乘以‘-2’，得出寿命的倒数 $1/\tau_\mathrm{F}$，可由下式求出电阻为

$$R=3cN/2e^2\rho v_\mathrm{F}^2\tau_\mathrm{F}=-(3cN/e^2\rho v_\mathrm{F}^2)\mathrm{Im}\Sigma(0+\mathrm{i}0^+), \tag{11.1.52}$$

其中 $\Sigma(x+\mathrm{i}0^+)$是 $\Sigma(\mathrm{i}\omega_n)$向实轴上方的解析延拓. 把(11.1.51)中的 $\mathrm{i}\omega_n$ 用 $x+\mathrm{i}0^+$ 代替，及应用公式 (11.1.47)、(11.1.24) 和(11.1.25)得出

$$\mathrm{Im}\Sigma(x+\mathrm{i}0^+)=\pi\left[g(x)+\frac{1}{2}\right]Q(x) \tag{11.1.53}$$

$$=-\frac{3\tau}{4N}\left[g(x)+\frac{1}{2}\right]$$

$$\mathrm{Im}\left[\frac{2K_0}{1+K_0-\frac{3}{4}K_0^2}-K_0\right]. \tag{11.1.54}$$

由于 $g(0)=\infty$，(11.1.54)式应在小 x 下计算，然后取 $x\to0$ 的极限. 把 K_0 分为实部和虚部，由(11.1.33)式知 x 小时有 $\mathrm{Im}K_0\ll\mathrm{Re}K_0$，所以(11.1.54)式成为

$$\mathrm{Im}\Sigma(x+\mathrm{i}0^+)=-\frac{3J}{4N}\left[g(x)+\frac{1}{2}\right](\mathrm{Im}K_0)\cdot\left\{\frac{2\left[1+\frac{3}{4}(\mathrm{Re}K_0)^2\right]}{\left[1+\mathrm{Re}K_0-\left(\frac{3}{4}K_0\right)^2\right]^2}-1\right\}. \tag{11.1.55}$$

从(11.1.33)和(11.1.40)式，我们有

$$\left[g(x)+\frac{1}{2}\right]\mathrm{Im}K_0=J\rho\pi/8N. \tag{11.1.56}$$

把上式代入(11.1.55)式，其中之 K_0 用(11.1.33)式代入，令 $x=0$，化简之后代入(11.1.52)式，得到电阻表达式是

$$R_{sd}=\frac{9\pi J^2c}{32e^2v_F^2N}\left[\frac{2\left(1+\frac{3}{4}K_0^2\right)}{\left(1+K_0-\frac{3}{4}K_0^2\right)^2}-1\right], \tag{11.1.57}$$

其中

$$K_0=\frac{J\rho}{2N}\ln\left(\frac{D}{2T}\right) \tag{11.1.58}$$

把 $J<0$ 时之 T_{k_1} 表达式（11.1.37）代入上式，知 $|K_0(T_{k_1})|=$

$\frac{2}{3}<1$. 在$|K_0|$小于1的条件下，把(11.1.57)按$\left(K_0-\frac{3}{4}K_0^2\right)$展开，得到

$$R_{sd}=\frac{9\pi J^2c}{32e^2v_F^2N}\left[1-\frac{2J\rho}{N}\ln\frac{D}{2T}\right] \tag{11.1.59}$$

上式是 Kondo 于 1964 年得到的结果. 在$J<0$时，即局域电子和传导电子是反铁磁耦合时，电阻随温度的下降而对数上升，通常电声子散射电阻随温度的5次方幂趋于0，因此自旋倒向散射电阻和电声子电阻合起来，将在电阻温度关系上给出极小值.

§11.2 重整化群[5]

一、引言

最初是由 Gell-Mann 和 Low 为改进基本粒子理论的微扰方法于 1954 年引入的，此后有 Bogoliubov 和 Shirkov 在 1959 年用于基本粒子理论的红外发散问题，Wilson 在 1959 年用于量子电动力学和紫外发散. Bonch-Bruevich 在 1962 年第一次把重整化群方法用于多体问题，处理了电子气. 此后有人用于单轴铁电体及 Kondo 问题，在相当于格林函数低级微扰近似下，解决了在 Kondo 温度处的不合理的发散. 由于下面介绍的重整化群方法的优点，可以预期这一方法在多体问题中还会有更多的应用.

为了易于明白重整化群方法的精神和步骤，先举一个已经用格林函数方法完全解决了的高密度电子气问题做例子，然后再讲重整化群方法在 Kondo 问题的应用.

以下将不涉及用于讨论临界现象的重整化群的形式.

重整化群的定义是：使 Dyson 方程不变的一系列把 Dyson 方程中的量(顶角部分、格林函数、相互作用常数等)乘以数值因子的变换. 这个方法的优点有二：一是变换后的量服从 Lie 方程，

有时比 Dyson 方程易于求解．二是可导致收敛快的级数展开．

二、高密度电子气

相互作用的 Dyson 方程是

$$V_{\text{eff}}(\boldsymbol{k},\omega)=V(\boldsymbol{k},\omega)+V_{\text{eff}}(\boldsymbol{k},\omega)\Pi(\boldsymbol{k},\omega)V(\boldsymbol{k},\omega).\tag{11.2.1}$$

设 $\omega=0$，(11.2.1)式化为

$$V_{\text{eff}}(\boldsymbol{k},0)=V(\boldsymbol{k},0)+V_{\text{eff}}(\boldsymbol{k},0)\Pi(\boldsymbol{k},0)V(\boldsymbol{k},0).\tag{11.2.2}$$

由于(11.2.2)式中 $V(\boldsymbol{k},0)$ 和 $\Pi(\boldsymbol{k},0)$ 是已知的，因此由(11.2.2)式立即可解出 $V_{\text{eff}}(\boldsymbol{k},0)$．以下用重整化群方法求出 $V(\boldsymbol{k},0)$．

设 $|\boldsymbol{k}|=k$，则由第三章 § 3.2 的公式知

$$V_{\text{eff}}(k)=\frac{4\pi e^2}{k^2}+V_{\text{eff}}(k)\left[-1+\frac{k_F}{k}\left(1-\frac{k^2}{4k_F^2}\right)\ln\left|\frac{1-\frac{1}{2}\frac{k}{k_F}}{1+\frac{1}{2}\frac{k}{k_F}}\right|\right]\frac{4\pi e^2}{k}.\tag{11.2.3}$$

为了写法简单，引入以下的量：

无量纲电荷 $$g^2=\frac{e^2m}{\hbar^2k_F}.\tag{11.2.4}$$

裸相互作用 $$D_0=\frac{1}{k^2}.\tag{11.2.5}$$

有效相互作用 $$D=V_{\text{eff}}(k)/4\pi e^2.\tag{11.2.6}$$

对泡函数 $$f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)=-\frac{2k_F^2}{\pi k^2}\left\{-1+\left(\frac{k_F^2}{k^2}\right)^{\frac{1}{2}}\left(1-\frac{k^2}{4k_F^2}\right)\ln\left|\frac{1-\frac{1}{2}\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)^{\frac{1}{2}}}{1+\frac{1}{2}\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)^{\frac{1}{2}}}\right|\right\}.\tag{11.2.7}$$

Dyson 方程(11.2.3)化为

$$D=D_0-Dg^2k^2f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)D_0. \tag{11.2.8}$$

更方便的是引入无量纲有效相互作用 d，

$$d\left(\frac{k^2}{k_F^2},\ g^2\right)\equiv k^2D(k^2,k_F^2,g^2). \tag{11.2.9}$$

$$d_0\equiv k^2D_0=1 \tag{11.2.9$'$}$$

则(11.2.8)式化为以下形式的 Dyson 方程

$$d=d_0-dg^2f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)d_0. \tag{11.2.10}$$

(11.2.10) 式表示 d 是 g^2 和 k^2/k_F^2 的函数. 从 (11.2.10) 式及 $f(\infty)=0$, 可知

$$d(\infty)=1. \tag{11.2.11}$$

以下用重整化群方法求出(11.2.10)式中的 d.

三、(高密度电子气中有效相互作用的)重整化群

把 Dyson 方程(11.2.10)作变换

$$\begin{aligned} &d\to Zd\equiv\tilde{d},\\ &d_0\to Zd_0=\tilde{d}_0,\\ &g^2\to Z^{-1}g^2=\tilde{g}^2, \end{aligned} \tag{11.2.12}$$

其中数值因子 Z 是实数，上有～表示变换后的量. 易核对 Dyson 方程 (11.2.10) 式在以上变换下不变，即变换后的量服从和(11.2.10)式同样形式的方程，所以(11.2.12)式是重整化群变换.

$$\tilde{d}=\tilde{d}_0-\tilde{d}\tilde{g}^2f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)\tilde{d}_0. \tag{11.2.13}$$

变换前的量 d, d_0, g^2 是真正的物理量，变换后的量 $\tilde{d}, \tilde{d}_0$, $\tilde{g}^2$ 是非物理的量. 定义不变电荷

$$g_{\rm inv}^2=g^2d=\tilde{g}^2\tilde{d} \tag{11.2.14}$$

g^2 是无量纲电荷，d 是无量纲有效相互作用，g^2d 相当于无量纲有

效电荷或无量纲屏蔽电荷. 从变换(11.2.2)知(11.2.14) 式是重整化群变换下的不变量.

乘子 Z 取任意数值都可以. 我们引入参数 λ, 选择如下的 Z 值

$$Z\left(\frac{\lambda}{k_F^2},\quad g^2\right)=\frac{1}{d\left(\frac{\lambda}{k_F^2},\ g^2\right)}. \tag{11.2.15}$$

取定上述的重整化群变换的乘子之后, 有

$$\begin{aligned}\tilde{d}&=Zd\left(\frac{k^2}{k_F^2},\quad g^2\right)=Z\left(\frac{\lambda}{k_F^2},\quad g^2\right)d\left(\frac{k^2}{k_F^2},\quad g^2\right)\\&=\frac{d\left(\frac{k^2}{k_F^2},g^2\right)}{d\left(\frac{\lambda}{k_F^2},g^2\right)}=\frac{d\left(\frac{k^2}{\lambda}\frac{\lambda}{k_F^2},g^2\right)}{d\left(\frac{\lambda}{k_F^2},g^2\right)}\\&=d\left(\frac{k^2}{\lambda},\frac{k_F^2}{\lambda},\tilde{g}_\lambda^2\right),\end{aligned} \tag{11.2.16}$$

其中

$$\tilde{g}_\lambda^2=\frac{g^2}{Z\left(\frac{\lambda}{k_F^2},g^2\right)}=g^2d\left(\frac{\lambda}{k_F^2},g^2\right). \tag{11.2.17}$$

在(11.2.16)式中令 $k^2=\lambda$, 则有

$$\begin{aligned}\tilde{d}\left(\frac{k^2}{\lambda},\frac{k_F^2}{\lambda},\tilde{g}_\lambda^2\right)&=\tilde{d}\left(1,\frac{k_F^2}{\lambda},\tilde{g}_\lambda^2\right)\\&=Z\left(\frac{\lambda}{k_F^2},g^2\right)d\left(\frac{\lambda}{k_F^2},g^2\right)=1,\end{aligned} \tag{11.2.18}$$

其中最后一个等式用到(11.2.15)式. 当 $k^2=\lambda$ 时, $\tilde{d}\left(\frac{k^2}{\lambda},\frac{k_F^2}{\lambda},\tilde{g}_\lambda^2\right)=1$, 所以把 λ 的参数 λ 称为归一化能量. 容易从(11.2.12) 看出 $Z=1$ 是重整化群的恒等变换. $Z=1$ 时, 由(11.2.15) 看出 $d\left(\frac{\lambda}{k_F^2},g^2\right)=1$. 在(11.2.11)式已经给出 $d\left(\frac{\infty}{k_F^2},g^2\right)=1$, 所以 $\lambda=\infty$ 时, $Z=1$.

四、重整化群泛函方程

为了导出重整化群泛函方程，把无量纲电荷 $\tilde{g}_\lambda^2$ 和有效相互作用 $\tilde{d}_\lambda$ 变换到 $\tilde{g}_{\lambda'}^2$ 和 $\tilde{d}_{\lambda'}$. 把 $\tilde{d}_\lambda$ 变换到 $\tilde{d}_{\lambda'}$. 由(11.2.16)式有

$$\tilde{d}_{\lambda'}=\tilde{d}\left(\frac{k^2}{\lambda'},\frac{k_{\mathrm{F}}^2}{\lambda'},\tilde{g}_{\lambda'}^2\right)=\frac{d\left(\frac{k^2}{k_{\mathrm{F}}^2},g^2\right)}{d\left(\frac{\lambda'}{k_{\mathrm{F}}^2},g^2\right)}. \tag{11.2.19}$$

用和(11.2.19)式相似的 $\tilde{d}_\lambda$ 的表达式除(11.2.19)式，得出

$$\begin{aligned}\tilde{d}\left(\frac{k^2}{\lambda'},\frac{k_{\mathrm{F}}^2}{\lambda'},\tilde{g}_{\lambda'}^2\right)&=\frac{d\left(\frac{\lambda}{k_{\mathrm{F}}^2},g^2\right)}{d\left(\frac{\lambda'}{k_{\mathrm{F}}^2},g^2\right)}\tilde{d}\left(\frac{k^2}{\lambda},\frac{k_{\mathrm{F}}^2}{\lambda},\tilde{g}_\lambda^2\right)\\&=\tilde{d}\left(\frac{\lambda}{\lambda'},\frac{k_{\mathrm{F}}^2}{\lambda'},\tilde{g}_{\lambda'}^2\right)\tilde{d}\left(\frac{k^2}{\lambda},\frac{k_{\mathrm{F}}^2}{\lambda},\tilde{g}_\lambda^2\right),\end{aligned} \tag{11.2.20}$$

其中后一等式用了(11.2.16)式的一个等式. 从(11.2.19)式容易看出 λ' 也是归一化能量.

把 $\tilde{g}_\lambda^2$ 变换到 $\tilde{g}_{\lambda'}^2$. 后者也满足(11.2.17)式，因此由(11.2.17)式可得出

$$\tilde{g}_{\lambda'}^2=\frac{d\left(\frac{\lambda'}{k_{\mathrm{F}}^2},g^2\right)}{d\left(\frac{\lambda}{k_{\mathrm{F}}^2},g^2\right)}\cdot\tilde{g}_\lambda^2=\frac{1}{\tilde{d}\left(\frac{\lambda}{\lambda'},\frac{k_{\mathrm{F}}^2}{\lambda'},\tilde{g}_{\lambda'}^2\right)}\tilde{g}_\lambda^2 \tag{11.2.21}$$

引入以下符号把表达式写得简单一些.

$$x=\frac{k^2}{\lambda'},\ y=\frac{k_{\mathrm{F}}^2}{\lambda'},\ \tilde{g}_{\lambda'}^2=\mathcal{J}^2,\ \ \frac{\lambda}{\lambda'}=t. \tag{11.2.22}$$

可以把(11.2.20)、(11.2.21)式分别改写为

$$\tilde{g}_\lambda^2=\mathcal{J}^2\tilde{d}(t,y,\mathcal{J}^2). \tag{11.2.23}$$

$$\tilde{d}(x,y,\mathcal{J}^2)=\tilde{d}(t,y,\ \mathcal{J}^2)\tilde{d}\left(\frac{x}{t},\frac{y}{t},\mathcal{J}^2\tilde{d}(t,y,\mathcal{J}^2)\right). \tag{11.2.24}$$

公式(11.2.24)称为重整化群的泛函方程，是“有效相互作用”$\tilde{d}$ 所满足的方程．它和 d 所满足的 Dyson 方程(11.2.10)的不同之处在于(11.2.24)不依赖 $f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)$，因此比(11.2.10)更普遍.

五、重整化群的李方程

以下把泛函方程(11.2.25)化为李方程．为此把(11.2.24)式双方对 x 求导数.

$$\frac{\partial \tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)}{\partial x}=\tilde{d}(t,y,\tilde{J}^2)\frac{\partial \tilde{d}\left(s,\frac{y}{x},\tilde{J}^2\tilde{d}(t,y\tilde{J}^2)\right)}{\partial s}\frac{1}{t}$$

$$=\frac{\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)}{x}\frac{\partial \tilde{d}\left(s,\frac{y}{x},\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)\right)}{\partial s}\Bigg|_{s=1} \tag{11.2.25}$$

得出(11.2.25)的第二式时考虑到 $t=\lambda/\lambda'$ 有任意性，令 $t=x$．(11.2.25)式右方的偏导数称为无限小生成元．考虑到 (11.2.18)式，知 $\tilde{d}(s=1,\frac{y}{x},\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2))=1$，可以把式(11.2.25)改写为另一形式

$$\frac{\partial \ln\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)}{\partial x}=\frac{1}{x}\frac{\partial \ln\tilde{d}\left(s,\frac{y}{x},\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)\right)}{\partial s}\Bigg|_{s=1} \tag{11.2.26}$$

公式 (11.2.25) 和 (11.2.26) 都称为 Lie 方程．如果我们能由(11.2.26)式解出 $\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)$，再由§11-2之三知 $\lambda=\infty$ 时，相当于 $Z=1$，是恒等变换，即可得到真正的相互作用，即

$$\tilde{d}_{\lambda=\infty}=Z_{\lambda=\infty}d\left(\frac{k^2}{k_F^2},g^2\right)=d\left(\frac{k^2}{k_F^2},g^2\right) \tag{11.2.27}$$

$$\tilde{g}^2_{\lambda=\infty}=g^2\frac{1}{Z_{\lambda=\infty}}=g^2 \qquad (11.2.27)'$$

以下证明不变电荷也满足 Lie 方程. 从(11.2.14)和 (11.2.22)式可以得出以下的等式

$$g_{\mathrm{inv}}^{2}=g^{2}{}_{\lambda}\tilde{d}_{\lambda}=\tilde{g}_{\lambda'}^{2}\tilde{d}_{\lambda'}=\tilde{g}_{\lambda'}^{2}\tilde{d}\left(\frac{k^{2}}{\lambda'},\frac{k_{\mathrm{F}}^{2}}{\lambda'},\ \tilde{g}_{\lambda'}^{2}\right)=\tilde{J}^{2}\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^{2}). \tag{11.2.28}$$

把(11.2.25)双方乘以 $\tilde{J}^2$,注意到(11.2.22)和(11.2.21) 式知 $\tilde{J}^2$ 不是 x 的函数,代入(11.2.28)式,得出

$$\frac{\partial g_{\mathrm{inv}}^{2}}{\partial x}=\frac{g_{\mathrm{inv}}^{2}}{x}\cdot\frac{\partial\tilde{d}\left(s,\frac{y}{x},g_{\mathrm{inv}}^{2}\right)}{\partial s}\Bigg|_{s=1} \tag{11.2.29}$$

六、Lie 方程的解

一般解法是把方程(11.2.25) 的无限小生成元部分的 $\tilde{d}$ 作近似,然后在边界条件(11.2.18)下解方程.

对高密度电子气体系来说,$\tilde{d}$ 的二级近似是

$$V_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{k},0)=V(\boldsymbol{k},0)+V(\boldsymbol{k},0)\pi(\boldsymbol{k},0)V(\boldsymbol{k},0). \tag{11.2.30}$$

由(11.2.10)式可知此二级近似的表达式是

$$d\left(\frac{k^{2}}{k_{\mathrm{F}}^{2}},g^{2}\right)\approx1-g^{2}f\left(\frac{k^{2}}{k_{\mathrm{F}}^{2}}\right). \tag{11.2.31}$$

相应的 $\tilde{d}_\lambda$ 的表达式由(11.2.16)式表示为

$$\begin{aligned}\tilde{d}_{\lambda}&=\tilde{d}\left(\frac{k^{2}}{\lambda},\frac{k_{\mathrm{F}}^{2}}{\lambda},\tilde{g}_{\lambda}^{2}\right)\\&=\frac{d\left(\frac{k^{2}}{k_{\mathrm{F}}^{2}},g^{2}\right)}{d\left(\frac{\lambda}{k_{\mathrm{F}}^{2}},g^{2}\right)}\approx\frac{1-g^{2}f\left(\frac{k^{2}}{k_{\mathrm{F}}^{2}}\right)}{1-g^{2}f\left(\frac{\lambda}{k_{\mathrm{F}}^{2}}\right)},\end{aligned} \tag{11.2.32}$$

其中最后一步代入了(11.2.31)式. 从(11.2.17)式和 (11.2.31)式得出

$$\tilde{g}_{\lambda}^{2}\approx g^{2}\left(1-g^{2}f\left(\frac{\lambda}{k_{\mathrm{F}}^{2}}\right)\right) \tag{11.2.33}$$

公式(11.2.32)的近似式是

$$\tilde{d}\approx 1-g^2\left[f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)-f\left(\frac{\lambda}{k_F^2}\right)\right]\approx 1-\bar{g}_\lambda^2\left[f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)-f\left(\frac{\lambda}{k_F^2}\right)\right]. \tag{11.2.34}$$

用(11.2.22)式的符号,可以把(11.2.34)式改写为

$$\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)\approx 1-\tilde{J}^2\left[f\left(\frac{x}{y}\right)-f\left(\frac{1}{y}\right)\right]. \tag{11.2.35}$$

把(11.2.35)双方符号改换一下,$x\to s$, $y\to y/x$, $\tilde{J}^2\to\tilde{J}^2 d(x, y, \tilde{J}^2)$,得出

$$\begin{aligned}&\tilde{d}\left(s,\frac{y}{x},\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)\right)\\&\approx 1-\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)\left[f\left(\frac{sx}{y}\right)-f\left(\frac{x}{y}\right)\right].\end{aligned} \tag{11.2.36}$$

上式相当于用不变电荷 $\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)$ 做展开,即用屏蔽电荷展开.把(11.2.36)代入到(11.2.25)式的生成元中,其中之

$$\left.\frac{\partial\tilde{d}}{\partial s}\right|_{s=1}=-\tilde{J}^2\tilde{d}(x, y, \tilde{J}^2)\frac{x}{y}\frac{\mathrm{d}f\left(\frac{x}{y}\right)}{\mathrm{d}\frac{x}{y}} \tag{11.2.37}$$

代入到(11.2.25)中,有

$$\frac{\partial\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)}{\partial x}=-\tilde{J}^2[\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)]^2\frac{\partial f\left(\frac{x}{y}\right)}{\partial x}. \tag{11.2.38}$$

上式易于求解.可得出

$$\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)=\frac{1}{B+\tilde{J}^2 f\left(\frac{x}{y}\right)}. \tag{11.2.39}$$

用边条件(11.2.18)式确定 B.

$$\tilde{d}(1,y,\tilde{J}^2)=1=\frac{1}{B+\tilde{J}^2 f\left(\frac{1}{y}\right)},$$

$$B=1-\tilde{J}^2 f\left(\frac{1}{y}\right). \tag{11.2.40}$$

把(11.2.40)式代入到(11.2.39)式中，

$$\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)=\frac{1}{1+\tilde{J}^2\left[f\left(\frac{x}{y}\right)-f\left(\frac{1}{y}\right)\right]} \tag{11.2.41}$$

用(11.2.22)式的变换，上式可化为

$$\tilde{d}\left(\frac{k^2}{\lambda},\frac{k_F^2}{\lambda},\tilde{g}_\lambda^2\right)=\frac{1}{1+\tilde{g}_\lambda^2\left[f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)-f\left(\frac{\lambda}{k_F^2}\right)\right]} \tag{11.2.42}$$

为了求物理的 d，令 $\lambda=\infty$，此时 $Z=1, d=\tilde{d}, \tilde{g}_\lambda^2=g_\lambda, f\left(\frac{\lambda}{k_F^2}\right)=0.$

$$d=\tilde{d}(\lambda)\big|_{\lambda=\infty}=\frac{1}{1+g^2 f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)} \tag{11.2.43}$$

(11.2.43)式正是格林函数方法的 RPA 的无限图形求和的结果. 但是在用重整化群方法导出上式时，没有做无限图形求和，只是取了一级近似. 此例说明 Lie 方程的收敛性比 Dyson 方程好.

由于对生成元的一级近似已经得到 Dyson 方程的无限图形求和的结果，可以预期对生成元的二级近似将给出零贡献. 以下验证一下，二级近似的 d 为

$$d\left(\frac{k^2}{k_F^2},g^2\right)\approx 1-g^2 f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)+\left[g^2 f\left(\frac{k^2}{k_F^2}\right)\right]^2 \tag{11.2.44}$$

用类似(11.2.36)的推导步骤，可导出

$$\begin{aligned} d&\left(s,\frac{y}{x},\tilde{J}^2 d(x,y,\tilde{J}^2)\right)\\ &\approx 1-\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)\left[f\left(\frac{sx}{y}\right)-f\left(\frac{x}{y}\right)\right]\\ &\quad+\{\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)\left[f\left(\frac{x}{y}\right)-f\left(\frac{x}{y}\right)\right]^2 \end{aligned} \tag{11.2.45}$$

$$\left(\frac{\partial \tilde{d}}{\partial s}\right)_{s=1}=-\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)\frac{x}{y}\frac{\mathrm{d}f\left(\frac{x}{y}\right)}{\mathrm{d}\frac{x}{y}}+2[\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)]^2$$

$$\times\left[f\left(\frac{sx}{y}\right)-f\left(\frac{x}{y}\right)\right]_{s=1}\frac{x}{y}\frac{\mathrm{d}f\left(\frac{x}{y}\right)}{\mathrm{d}\frac{x}{y}} \qquad (11.2.46)$$

上式中$\left[f\left(\frac{sx}{y}\right)-f\left(\frac{x}{y}\right)\right]_{s=1}=0$,即二级项贡献为0. 仿此得出更高级项的贡献也是0.

Lie 方程收敛快的原因是 (11.2.36) 式用无量纲屏蔽电荷作展开. $\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)$ 是无量纲屏蔽电荷这一点可以从以下的分析看出来. 由(11.2.23),(11.2.17)和(11.2.9)三式可知

$$\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)=\tilde{g}_\lambda^2=g^2d\left(\frac{\lambda}{k_F^2},g^2\right)$$
$$=g^2\lambda D(\lambda,k_F^2,g^2). \qquad (11.2.47)$$

再考虑到(11.2.4)和(11.2.6)的 g^2 和D的定义式, (11.2.47)式成为

$$\tilde{J}^2\tilde{d}(x,y,\tilde{J}^2)=\frac{e^2m}{\hbar^2k_F}\frac{V_{\rm eff}(\lambda,k_F^2,e^2m/\hbar^2k_F)}{4\pi e^2/\lambda}. \qquad (11.2.48)$$

上式右方第二个分数因子是无量纲有效相互作用 (有效相互作用用零级相互作用除),因此相当于使无量纲电荷 $e^2m/\hbar k_F$ 变为无量纲屏蔽电荷.

§11.3 Kondo 效应的重整化群理论[6]

一、用重整化群方法处理 Kondo 效应的必要性

设在非磁性的基体金属中加入少量(10^{-3}—10^{-6}) 磁性原子,如果磁性原子能保持其局域磁矩,则成为磁性杂质. 设磁性杂质之

间没有关联，是单杂质问题，只考虑一个磁性杂质即可. 已经发现在传导电子和磁性原子的局域电子之间存在着 s-d 交换作用，相应的哈密顿量由(11.2.12)式给出为

$$\hat{H}_{sd}=-J\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{S}\delta(\boldsymbol{r}), \tag{11.3.1}$$

其中和(11.1.12) 式不同的是假设接触作用，即取 $f(\boldsymbol{r})=\delta(\boldsymbol{r})$. H_{sd} 的二次量子化形式是

$$H_{sd}=\tilde{J}\sum_{kk'\alpha\alpha'\beta\beta'}\sigma_{\alpha\alpha'}\cdot S_{\beta\beta'}c_{k\alpha}^{+}c_{k'\alpha'}d_{\beta}^{+}d_{\beta'}, \tag{11.3.2}$$

上式和(11.1.13)式比较，此处之 $\tilde{J}$ 等于(11.1.13)的 $-J/2N$. 从 § 11-2 的讨论可知，用(11.3.2)式的哈密顿量计算散射截面等物理量时，主要图形部分求和的表达式在 $\omega=T_k$ 处发散. 但是实验(例如电阻测量)上从未观察到此发散. 人们猜测这是由于低温下 s-d 作用强，原格林函数微扰方法不易应用造成的. 许多人做了用重整化群方法处理的尝试，并且取得好的结果. 以下分步骤讲述具体处理方法.

二、(找出)Kondo 问题的重整化群.

为了以下讨论的需要，先规定符号及图形，如表 11-1 所示. 表 11-1 中的符号所对应的 Feyman 图形如图 11-5 所示.

表 11-1

符号 \ 量	传导电子格林函数	赝费密子格林函数	无量纲耦合	顶角部分
变换前	G	g	$\bar{J}=\tilde{J}\rho$	Γ^J
变换后	$Z_1G=\tilde{G}$	$Z_2g=\tilde{g}$	$Z_3Z_1^{-1}Z_2^{-1}\bar{J}=\tilde{\bar{J}}$	$Z_3^{-}\Gamma^J=\tilde{\Gamma}^J$

赝费密子格林函数 g 所满足的 Dyson 方程分别用 Feyman 图及表达式表示为图 11-6 及式(11.3.3).

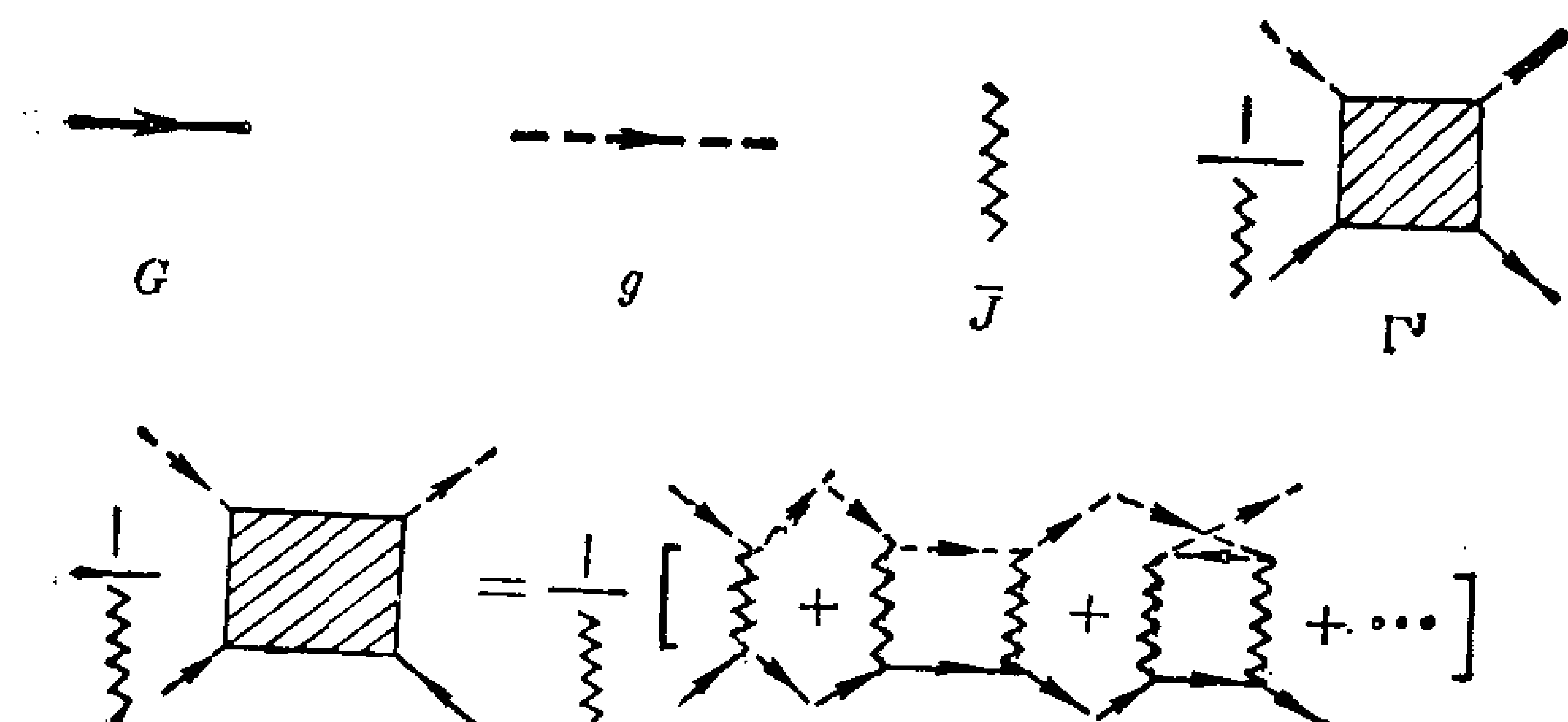


图11.5 表 11.1 的符号所对应的图形

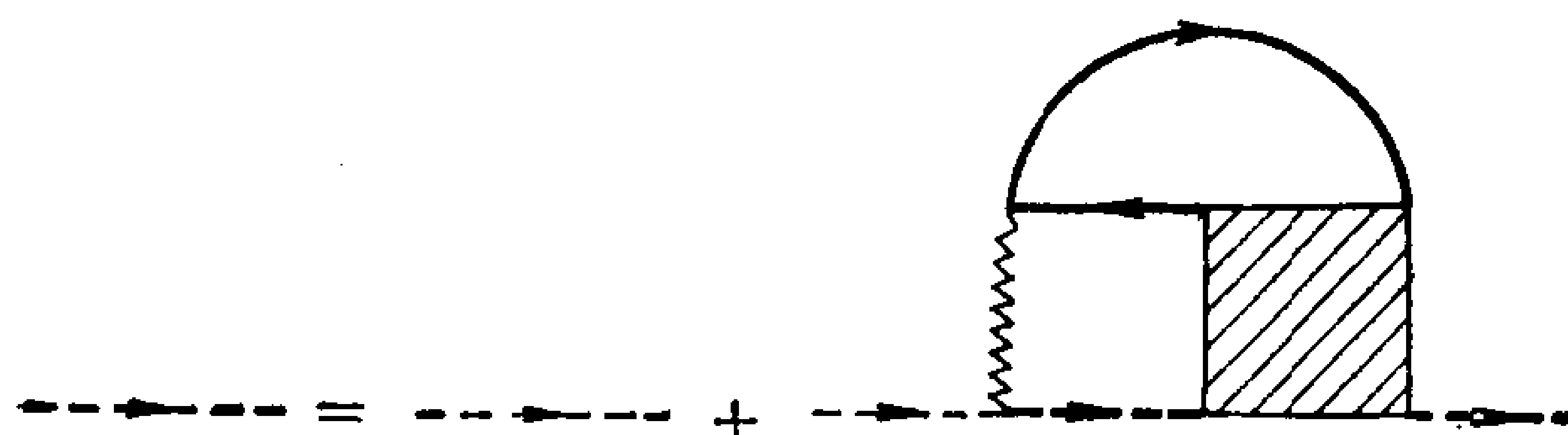


图 11.6 Feyman 图表示的 g 所满足的 Dyson 方程

$$g=g_0+g_0\tilde{J}\rho\int\mathrm{d}E\Gamma^{J(0)}\tilde{J}\rho\int\mathrm{d}E_1gGG\Gamma^Jg. \qquad (11.3.3)$$

可以用直接的代入方法，验证表 11-1 的变换后的量也满足和公式(11.3.3)完全相同的 Dyson 方程，所以表 11-1 的变换是重整化群变换. 注意，在重整化群变换中，自旋算符点乘的因子(包含在 $\hat{H}_{sd}$ 中)不变换，所以在表 11-1 中略去了 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{S}$ 因子，同时也略去了 G 和 g 的自旋角标. 以后为方便令 $g=\frac{1}{\omega}\mathrm{d}(\omega)$. 不对传导电子格林函数作重整化群变换，即取 $Z_1=1$.

引入归一化能量(又称能量参数)λ. 用 $F\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)$代表 $\tilde{d}$ 或 $\tilde{\Gamma}^J$. 归一化的意思是 $\omega=\lambda$ 时，

$$F\left(1,\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)=1. \qquad (11.3.4)$$

三、重整化群泛函方程

为建立重整化群泛函方程，把λ变换为λ'. 设

$$\tilde{d}\left(\frac{\omega}{\lambda'},\frac{D}{\lambda'},\tilde{\bar{J}}_{\lambda'}\right)=X\tilde{d}\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right) \tag{11.3.5}$$

上式取$\omega=\lambda'$，则由(11.3.4)知其左方为1. 上式的右方为$X\tilde{d}\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)$，所以上式可化为

$$X=\frac{1}{\tilde{d}\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)} \tag{11.3.6}$$

把(11.3.6)代入到(11.3.5)式中，得出"局域电子格林函数"$\tilde{d}$的泛函方程是

$$\tilde{d}\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)=\tilde{d}\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)\tilde{d}\left(\frac{\omega}{\lambda'},\frac{D}{\lambda'},\tilde{\bar{J}}_{\lambda'}\right) \tag{11.3.7}$$

同样的办法可得出"顶角部分"$\tilde{\Gamma}^J$的泛函方程是

$$\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)=\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\omega}{\lambda'},\frac{D}{\lambda'},\tilde{\bar{J}}_{\lambda'}\right) \tag{11.3.8}$$

在(11.3.7)和(11.3.8)式中的$\tilde{\bar{J}}_{\lambda'}$和$\tilde{\bar{J}}_{\lambda}$满足如下的重整化群变换

$$\tilde{\bar{J}}_{\lambda'}=Z_3Z_1^{-1}Z_2^{-1}\tilde{\bar{J}}_{\lambda}=Z_3Z_2^{-1}\tilde{\bar{J}}_{\lambda} \tag{11.3.9}$$

已规定不对传导电子格林函数作重整化群变换，所以取了$Z_1=1$. 从(11.3.7)可得出$Z_2=\left[\tilde{d}\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)\right]^{-1}$，从(11.3.8)式又可得出$Z_3^{-1}=\left[\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)\right]^{-1}$，代入到(11.3.9)式中，有

$$\begin{aligned}\tilde{\bar{J}}_{\lambda'}&=\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)\tilde{d}\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\\&=:\psi^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\right)\tilde{\bar{J}}_{\lambda}\end{aligned} \tag{11.3.10}$$

其中定义

$$\psi^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)=\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)\tilde{d}\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right) \qquad (11.3.11)$$

四、建立 Lie 方程

以下把泛函方程化为 Lie 方程. 为书写简单,引入变数

$$x=\frac{\omega}{\lambda},\ y=\frac{D}{\lambda},\ t=\frac{\lambda'}{\lambda}, \qquad (11.3.12)$$

则(11.3.7)式化为

$$\tilde{d}(x,y,\tilde{J}_\lambda)=\tilde{d}(t,y,\tilde{J}_\lambda)\ \tilde{d}\left(\frac{x}{t},\frac{y}{t},\tilde{J}_\lambda\psi^J(t,y,\ \tilde{J}_\lambda)\right) \qquad (11.3.13)$$

对 x 求导数

$$\frac{\partial\tilde{d}(x,y,\ \tilde{J}_\lambda)}{\partial x}=\tilde{d}(t,y,\tilde{J}_\lambda)\frac{\partial}{\partial s}\tilde{d}\left(s,\frac{y}{x},\tilde{J}_\lambda\psi^J(t,y,\ \tilde{J}_\lambda)\right)\frac{1}{t} \qquad (11.3.14)$$

由于 $t=\frac{\lambda'}{\lambda}$的值有任意性,令 $t=x$,于是(11.3.14)成为

$$\frac{\partial\tilde{d}(x,y,\ \tilde{J}_\lambda)}{\partial x}=\frac{\tilde{d}(x,\ y,\ \tilde{J}_\lambda)}{x}\frac{\partial}{\partial s}\tilde{d}\left(s,\ \frac{y}{x},\tilde{J}_\lambda\psi^J(x,y,\ \tilde{J}_\lambda)\right)\bigg|_{s=1} \qquad (11.3.15)$$

考虑到 $\tilde{d}\left(s,\frac{y}{x},\tilde{J}_\lambda\psi^J(x,y,\ \tilde{J}_\lambda)\right)$ 有归一化条件 (11.3.4),可把(11.3.15)式改写成

$$\frac{\partial\ln\tilde{d}(x,y,\tilde{J}_\lambda)}{\partial x}=\frac{1}{x}\frac{\partial\ln\tilde{d}(s,\frac{y}{x},\ \tilde{J}_\lambda\psi^J(x,y,\ \tilde{J}_\lambda))}{\partial s}\Bigg|_{s=1} \qquad (11.3.16)$$

(11.3.15)和(11.3.16)式都称为重整化群的 Lie 方程.

也可证明(11.3.11)式定义的ψ^J满足泛函方程及Lie方程. 在(11.3.11)式中令$\lambda^1=\omega$,则有

$$\psi^J\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)=\tilde{d}\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right) \tag{11.3.17}$$

设

$$\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\omega}{\lambda'},\frac{D}{\lambda'},\tilde{J}_{\lambda'}\right)\tilde{d}\left(\frac{\omega}{\lambda'},\frac{D}{\lambda'},\tilde{J}_{\lambda'}\right)=X\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)\tilde{d}\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right) \tag{11.3.18}$$

即

$$\psi^J\left(\frac{\omega}{\lambda'},\frac{D}{\lambda'},\tilde{J}_{\lambda'}\right)=X\psi^J\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right) \tag{11.3.18$'$}$$

在(11.3.18)和(11.3.18)$'$式中令$\omega=\lambda'$,由归一化条件(11.3.4),得出

$$X=\frac{1}{\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)\tilde{d}\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)}=\frac{1}{\psi^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)} \tag{11.3.19}$$

把(11.3.19)代入到(11.3.18)$'$式中,得出

$$\psi^J\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)=\psi^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)\psi^J\left(\frac{\omega}{\lambda'},\frac{D}{\lambda'},\tilde{J}_{\lambda'}\right) \tag{11.3.20}$$

$$=\psi^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)\psi^J\times\left(\frac{\omega}{\lambda'},\frac{D}{\lambda'},\tilde{J}_\lambda,\psi^J\left(\frac{\lambda'}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)\right) \tag{11.3.20$'$}$$

也可在(11.3.20)式中采用(11.3.12)式的变数,对x求偏导数,及令$t=x$,分别得到如下的泛函方程和Lie方程.

$$\psi^J(x,y,\tilde{J}_\lambda)=\psi^J(t,y,\tilde{J}_\lambda)\psi^J\left(\frac{x}{t},\frac{y}{t},\tilde{J}_\lambda\psi^J(t,y\ \tilde{J}_\lambda)\right). \tag{11.3.21}$$

$$\frac{\partial\psi^J(x,y\,\tilde{J})}{\partial x}=\psi^J(t,y,\,\tilde{J}_\lambda)\,\frac{\partial\psi^J\left(s,\dfrac{y}{t},\tilde{J}_\lambda\psi^J(t,y,\,\tilde{J}_\lambda)\right)}{\partial s}\,\frac{1}{t}$$

$$=\frac{\psi^J(x,y,\tilde{J}_\lambda)}{x}\frac{\partial}{\partial s}\psi^J\left(s,\frac{y}{x},\tilde{J}_\lambda\psi^J\;(x,\;y,\;\tilde{J}_\lambda)\right)\Big|_{s=1}\qquad(11.3.21)'$$

从表 11-1 可知重整化群变换下的不变耦合是

$$J_{\text{inv}}=\tilde{J}_\lambda\psi^J.\qquad(11.3.22)$$

应用(11.3.20)、(11.3.5)及(11.3.6)三式可以证明

$$\tilde{J}_\lambda\psi^{J\lambda}=\tilde{J}_{\lambda'}\psi^J_{\lambda'}.\qquad(11.3.23)$$

五、解 Lie 方程

为了求解 Lie 方程，应当先求出 Lie 方程中无限小生成元部分的近似表达式.

在考虑到归一化条件之后，可以把(11.3.21)式写作

$$\frac{\partial\psi^J(x,y,\tilde{J})}{\partial x}=\frac{\psi^J(x,y,\tilde{J}_\lambda)}{x}\;\frac{\partial\ln\psi^J\left(s,\dfrac{y}{x}\tilde{J}\psi^J(x,y,\tilde{J})\right)}{\partial s}\Bigg|_{s=1}\qquad(11.3.24)$$

为了写出(11.3.24)式右方生成元部分 ψ^J 的近似表达式，分析一下(11.3.17)式. 其中之 $d(\omega,D,\bar{J})$ 的零级近似式是 1，一级近似是零，二级近似不为零，因此在 ψ^J 的一级近似下，

$$\psi^J\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)=\tilde{\Gamma}^J\left(\frac{\omega}{\lambda},\frac{D}{\lambda},\tilde{J}_\lambda\right)\qquad(11.3.25)$$

其中之 $\tilde{\Gamma}^J$ 只算到一级近似. Γ^J 的第一级近似如图 11-7 的 a 和 b 所示.

Γ^J 只算到一级近似的表达式是

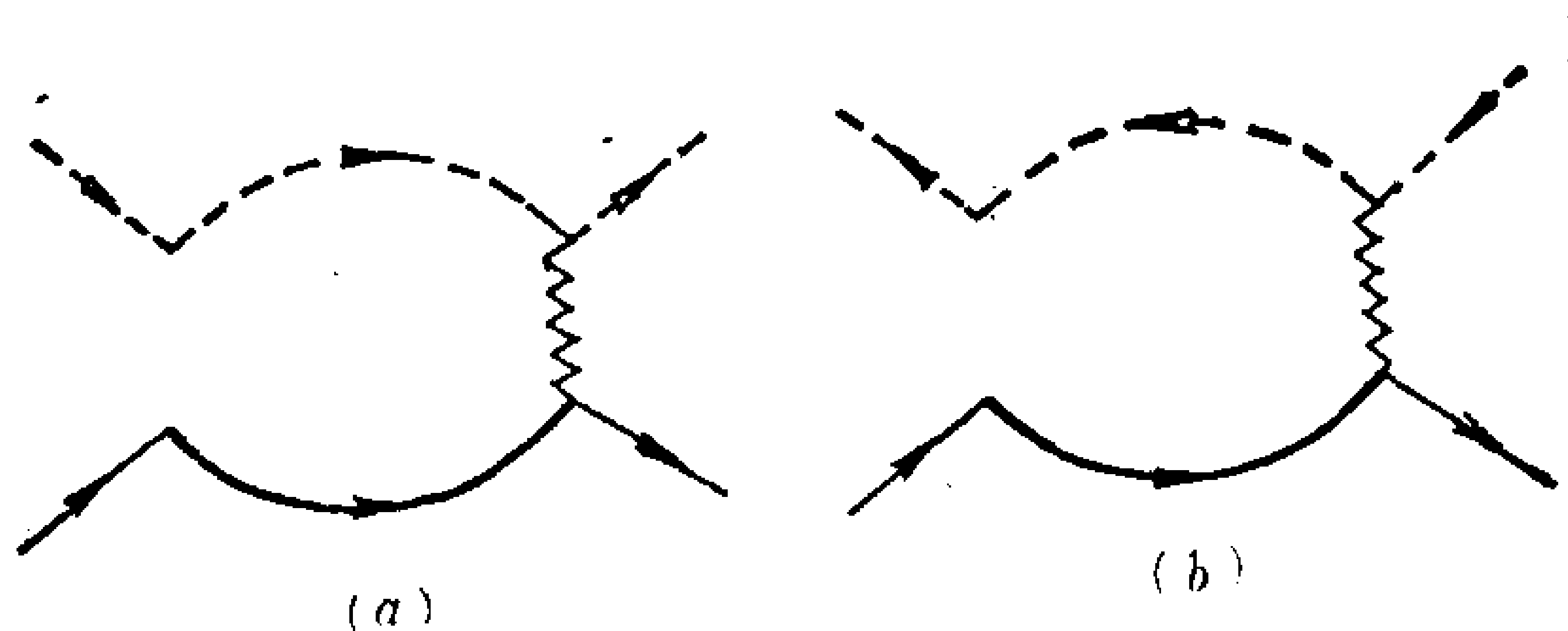


图 11.7 Γ^J的一级近似图: a: 粒子-粒子散射; b: 粒子-空穴散射

$$
\begin{aligned}
\Gamma^J(\omega, D, \tilde{J}) = & 1 - \mathrm{i}\tilde{J}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha''}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta''}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha''\alpha'}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta''\beta'}\cdot N(E_F)\cdot \\
& \cdot\frac{1}{2\pi}\int d\omega_1\int d\xi_1\frac{1}{\omega_1+\mathrm{i}0^+}\frac{1}{\omega-\omega_1-\xi_1+\mathrm{i}0^+\mathrm{sign}\xi_1} \\
& - \mathrm{i}\tilde{J}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha''}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta''\beta}\boldsymbol{\sigma}_{\alpha''\alpha'}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta'\beta''}N(E_F) \\
& \cdot\frac{1}{2\pi}\int d\omega_1\int d\xi_1\frac{1}{\omega_1+\mathrm{i}0^+}\frac{1}{\omega+\omega_1-\xi_1+\mathrm{i}0^+\mathrm{sign}\xi_1} \\
= & 1 + \tilde{J}N(E_F)[S(S+1)-\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha'}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta'}][\ln\left|\frac{\omega}{D}\right| \\
& + \mathrm{i}\pi\theta(\omega)] \\
& - \tilde{J}N(E_F)[S(S+1)+\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha'}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta'}]\left[\ln\left|\frac{\omega}{D}\right|\right. \\
& \left. + \mathrm{i}\pi\theta(-\omega)\right] \\
= & 1 - 2\tilde{J}N(E_F)\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha'}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta'}\ln\left|\frac{\omega}{D}\right| \\
& + \mathrm{i}\pi[\theta(\omega)-\theta(-\omega)]\tilde{J}N(E_F)S(S+1) \\
& - \mathrm{i}\pi[\theta(\omega)+\theta(-\omega)]\tilde{J}N(E_F)\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha'}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta'}.
\end{aligned}
\tag{11.3.26}
$$

把(11.3.26)代入到(11.3.25)式中，不讨论弛豫问题，略去虚部，写表达式时略去 $\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\alpha'}\cdot\boldsymbol{S}_{\beta\beta'}$ 因子，而有

$$
\Gamma^J(\omega, D, \tilde{J}) = 1 + 2\tilde{J}N(E_F)\ln\frac{D}{|\omega|} = 1 + 2\tilde{J}\ln\frac{D}{|\omega|}.
\tag{11.3.27}
$$

以下的做法类似从(11.2.31)到(11.2.43)式的推导．详细写

出如下. 一级近似的 ψ^J 为

$$\psi^J\left(\frac{\omega}{\lambda}, \frac{D}{\lambda}, \tilde{J}_\lambda\right)=\Gamma^J\left(\frac{\omega}{\lambda}, \frac{D}{\lambda}, \tilde{J}_\lambda\right)=Z_3^{-1}\Gamma^J(\omega, D, J)$$

$$=\frac{1+2\bar{J}\ln\frac{D}{\lambda}\cdot\frac{\lambda}{\omega}}{1+2\bar{J}\ln\frac{D}{\lambda}}. \tag{11.3.28}$$

由表 11-1 知 $\tilde{J}_\lambda=Z_3Z_1^{-1}Z_2^{-1}\bar{J}$, 不对传导电子格林函数 G 作变换, $Z_1=1$, 再由(11.2.23)式下面一小段的分析知 Z_2 也可取零级近似值 1. 于是

$$\tilde{J}_\lambda\approx\bar{J}Z_3=\bar{J}\left(1+2\bar{J}\ln\frac{D}{\lambda}\right)\approx\bar{J} \tag{11.3.29}$$

(11.3.28)式的近似式是

$$\psi^J\left(\frac{\omega}{\lambda}, \frac{D}{\lambda}, \tilde{J}_\lambda\right)=1+2\bar{J}\ln\frac{D}{\lambda}\frac{\lambda}{\omega}+2\bar{J}\ln\frac{\lambda}{D}$$

$$\approx1+2\tilde{J}_\lambda\ln\frac{D}{\lambda}\frac{\lambda}{\omega}+2\tilde{J}\ln\frac{\lambda}{D}. \tag{11.3.30}$$

用(11.3.12)式的符号可把(11.3.30)式改写为

$$\psi^J(x, y, \tilde{J}_\lambda)\approx1+2\tilde{J}_\lambda\ln\frac{y}{x}+2\tilde{J}_\lambda\ln\frac{1}{y}$$

$$=1-2\tilde{J}_\lambda\left[\ln\frac{x}{y}-\ln\frac{1}{y}\right]. \tag{11.3.31}$$

把(11.3.31)双方符号改写一下, $x\to s, y\to y/x, \tilde{J}_\lambda\to\tilde{J}_\lambda\psi^J(x, y, \tilde{J}_\lambda)$, 则有

$$\psi^J\left(s, \frac{y}{x}, \tilde{J}_\lambda\psi^J(x, y, \tilde{J}_\lambda)\right)=1-2\tilde{J}_\lambda\psi^J(x, y, \tilde{J}_\lambda)\left[\ln^s\frac{x}{y}-\ln\frac{x}{y}\right] \tag{11.3.32}$$

把(11.3.32)代入到(11.3.23)的生成元部份, 得出

$$\left.\frac{\partial \ln \psi^J\left(s, \frac{y}{x}, \tilde{J}\psi^J(x, y, \tilde{\tilde{J}}_\lambda)\right)}{\partial s}\right|_{s=1} = \frac{1}{\psi^J\left(1, \frac{y}{x}, \tilde{\tilde{J}}_\lambda \psi^J(x, y, \tilde{\tilde{J}}_\lambda)\right)}$$

$$\cdot\left[-2\tilde{\tilde{J}}_\lambda \psi^J(x, y, \tilde{\tilde{J}}_\lambda)\frac{\mathrm{d}\ln\frac{x}{y}}{\mathrm{d}\frac{x}{y}}\cdot\frac{x}{y}\right] \tag{11.3.33}$$

把(11.3.33)代入到(11.3.23)式中，有

$$\frac{\partial \psi^J(x, y, \tilde{\tilde{J}}_\lambda)}{\partial x} = -2\tilde{\tilde{J}}_\lambda[\psi^J(x, y, \tilde{\tilde{J}}_\lambda)]^2\frac{\partial \ln\frac{x}{y}}{\partial x}. \tag{11.3.34}$$

方程(11.3.34)易于求解，可得出

$$\psi^J(x, y, \tilde{\tilde{J}}_\lambda) = \frac{1}{B + 2\tilde{\tilde{J}}_\lambda \ln\frac{x}{y}}. \tag{11.3.35}$$

用边条件 $\psi^J(1, y, \tilde{\tilde{J}}_\lambda) = 1$，可以定出

$$B = 1 - 2\tilde{\tilde{J}}_\lambda \ln\frac{1}{y}. \tag{11.3.36}$$

把(11.3.36)代入到(11.3.35)式中，

$$\psi^J(x, y, \tilde{\tilde{J}}_\lambda) = \frac{1}{1 + 2\tilde{\tilde{J}}_\lambda\left[\ln\frac{x}{y} - \ln\frac{1}{y}\right]}. \tag{11.3.37}$$

用变换(11.3.12)，上式可改写为

$$\psi^J\left(\frac{\omega}{\lambda}, \frac{D}{\lambda}, \tilde{\tilde{J}}_\lambda\right) = \frac{1}{1 + 2\tilde{\tilde{J}}_\lambda\left[\ln\frac{\omega}{D} - \ln\frac{\lambda}{D}\right]}. \tag{11.3.38}$$

为了由(11.3.38)式求出物理的顶角函数，由(11.3.28)式求出 $Z_3 = 1$ 时的 $\lambda = D$，代入上式，得出物理的顶角函数为

$$\Gamma^J(\omega, D, \bar{J}) = \psi^J(\omega, D, \bar{J}) = \frac{1}{1 + 2\bar{J}\ln\frac{\omega}{D}}. \tag{11.3.39}$$

上式在ω取特殊值时发散，易求出此特殊值是

$$\omega_c = De^{-\frac{1}{2\tilde{J}}}. \tag{11.3.40}$$

由顶角发散可导出局域格林函数 g 发散及观察量发散. 但是实际的物理量不发散，因此计算 ψ^J 的二级近似，把 $d(\omega, D, \tilde{J})$ 和 $\Gamma^J(\omega, D, \tilde{J})$ 都先算到二级近似. d 和Γ^J 的第二级近似图分别表示在图 11.8 和图 11.9 中.

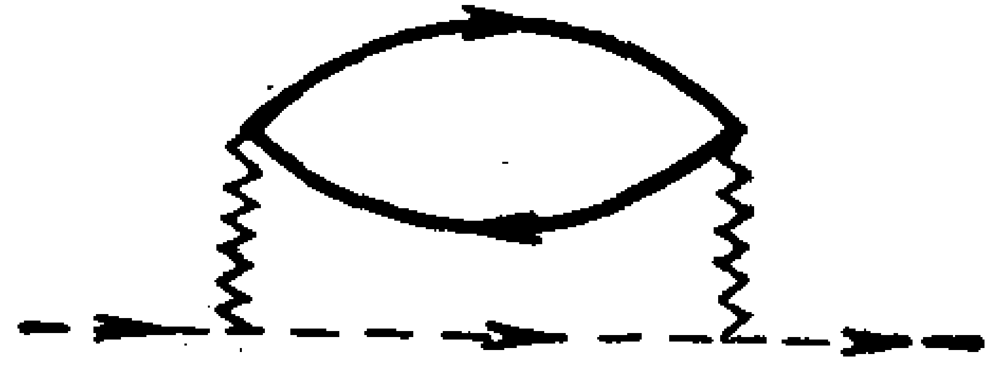


图 11.8 d$(\omega, D, \tilde{J})$的二级图

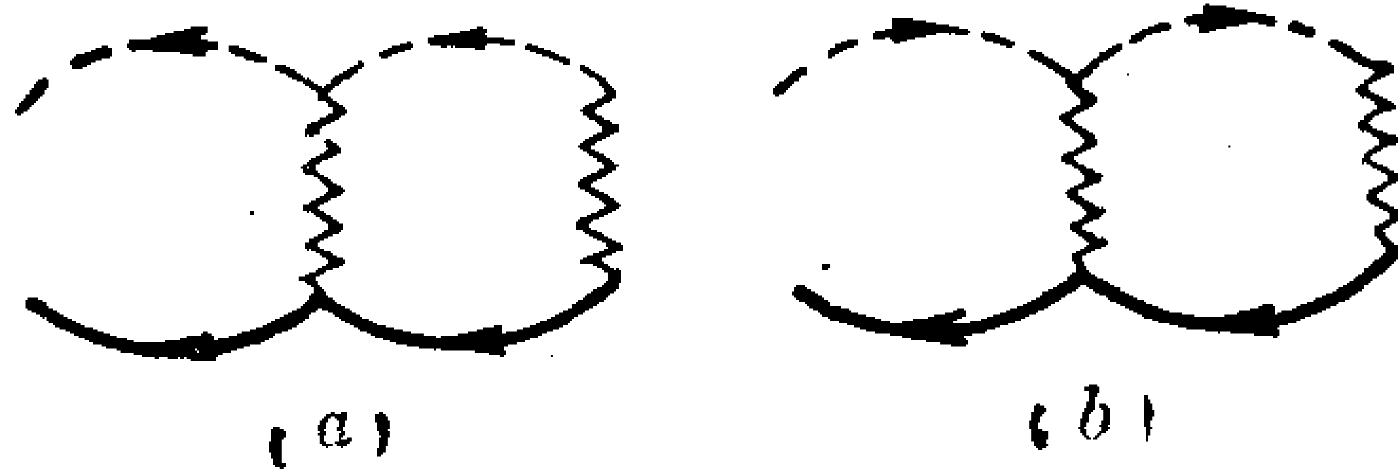


图 11.9 $\Gamma^J(\omega, D, \tilde{J})$的二级图: a: 粒子-粒子散射; b: 粒子-空穴散射

应用 Feyman 图的图解规则，可分别求出 d 及 Γ^J 的直到二级近似的表达式是

$$d(\omega, D, \tilde{J}) = \omega g(\omega, D, \tilde{J}) = 1 - 2\tilde{J}^2 s(s+1)\ln\frac{D}{\omega}. \tag{11.3.41}$$

$$\Gamma^J(\omega, D, \tilde{J}) = 1 - 2\tilde{J}\ln\frac{D}{\omega} + \tilde{J}^2[s(s+1)-1]\ln\frac{D}{\omega} \tag{11.3.42}$$

类似导出一级近似的 Lie 方程的方法，可求出二级近似下的 Lie 方程为

$$\frac{\partial}{\partial x}\ln\psi^J(x, y, \tilde{J}_\lambda) = \frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial s}\left[\ln\psi^J\left(s, \frac{y}{x}, \tilde{J}_\lambda\psi^J(x, y, \tilde{J}_\lambda)\right)\right]\Big|_{s=1}$$

$$= \frac{1}{x}\frac{1}{\partial s}\left[\tilde{\Gamma}^J\left(s, \frac{y}{x}, \tilde{J}_\lambda\psi^J(x, y, \tilde{J}_\lambda)\right)\tilde{d}\left(s, \frac{y}{x}, \tilde{J}\psi^J(x, y, \tilde{J}_\lambda)\right)\right]\Big|_{s=1} \tag{11.3.43}$$

$$
\frac{1}{\psi^J(x,y,\tilde{\bar{J}}_\lambda)}\frac{\partial}{\partial x}\psi^J(x,y,\tilde{\bar{J}}_\lambda)
$$

$$
=\frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial s}\left\{\left[1-2\tilde{\bar{J}}\psi^J\ln\frac{1}{s}\frac{y}{x}+2(\tilde{\bar{J}}\psi^J)^2\times(s(s+1)-1)\ln\frac{1}{s}\frac{y}{x}\right]\cdot\left[1-2(\tilde{\bar{J}}\psi^J)^2 s(s+1)\ln\frac{1}{s}\frac{y}{x}\right]\right\}\Bigg|_{s=1}.
$$

$$
\approx\frac{2}{x}\left[\tilde{\bar{J}}_\lambda\psi^J(x,y,\tilde{\bar{J}}_\lambda)\right]^2-\tilde{\bar{J}}_\lambda\psi^J(x,y,\tilde{\bar{J}}_\lambda),
\tag{11.3.44}
$$

其中最后一步近似式的导出是上一等式的各项都保留到$\tilde{\bar{J}}_\lambda\psi^J(x,y,\tilde{\bar{J}}_\lambda)$的平方项得到的．由方程(11.3.44)解出$\psi^J(x,y,\tilde{\bar{J}}_\lambda)$，即可求出物理的$\psi^J(\omega,D,\bar{J})$．$\bar{J}>0$时数值计算得出的$\psi^J(\omega,D,\bar{J})$的$\omega$依赖关系是如图11.10所示，

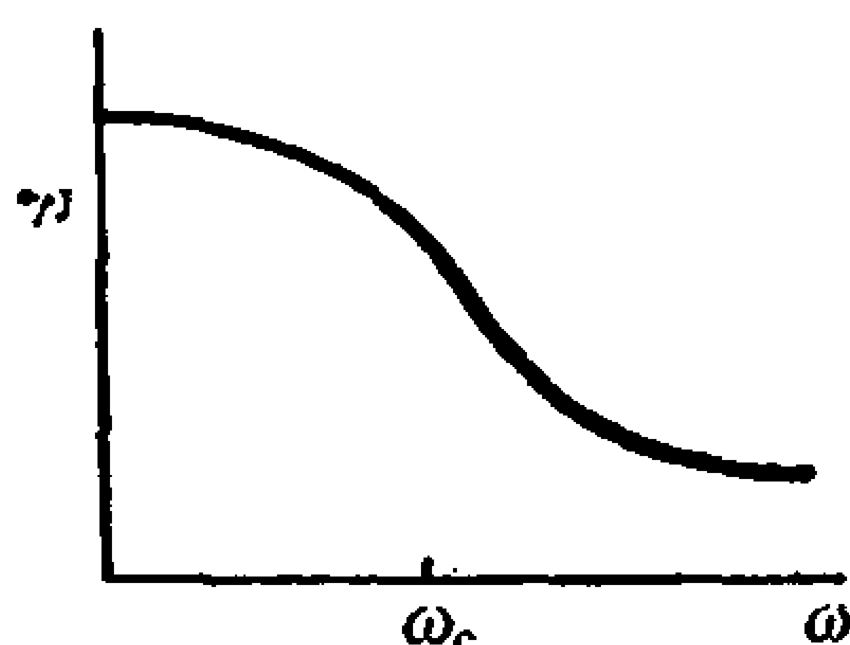


图 11.10　$\psi^J(\omega,D,\bar{J})$和ω依赖关系曲线

由图可见$\psi^J(\omega,D,\bar{J})$在$\omega=\omega_c$处不发散．而$\psi^J(\omega,D,\bar{J})=d(\omega,D,\bar{J})\Gamma^J(\omega,D,\bar{J})$，所以可以说顶角函数$\Gamma^J(\omega,D,\bar{J})$在$\omega=\omega_c$处不发散．

值得注意的是用重整化群方法解决自旋倒向散射引起的在$\omega=\omega_c$处的发散不需要用高级近似，但是用通常的多体格林函数方法为了消除发散必需使用很复杂的无穷图形求和技术．

参考文献

[1] J. Kondo, *Solid State Physics*, **23**(1969), 183.

[2] J. Callaway, *Quantum Theory of The Solid State*, Academic Press, New York, 1976, p. 449.

[3] A. A. Abriksov, *Physics*, **2**(1965), 5.

[4] C. Y. Cheung, R. D. Mattuck, *Phys. Rev.*, B. **2**(1970), 2735.

[5] R. D. Mattuck, *A Guide to Feyman Diagrams in The Many-Body Problem*, McGraw-Hill inc., 1976, p. 328.

[6] M. Fowler, A. Zawadowski, *Solid State Comm.*, **9**(1971), 471.

第十二章 直接统计微扰论及其在变价理论中的应用

§ 12.1 直接统计微扰论[1]

一、引言

前面各章中所讲的格林函数方法基本的步骤是把费密子或玻色子当做自由的,其间之相互作用当做微扰,对微扰级数用Wick定理,得出连接图定理,有标准的 Feymen-Dyson 展开.

在固体物理中有一些过程,其相互作用哈密顿量中包含的算符既不满足费密型对易关系,也不满足玻色型对易关系,因而不能应用 Wick 定理,也就不能证明连接图定理.以下举出三个这样的例子.

例一: 非磁金属基体中含有磁性杂质.传导电子和磁性原子上的局域电子的 sd 相互作用哈密顿量在第十一章已给出为

$$\hat{H}_{sd}=\frac{-J}{2N}\sum_{kk'}\sum_{\sigma\sigma'}\hat{S}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'}c_{k\sigma}^{+}c_{k'\sigma'},\qquad(12.1.1)$$

其中 $\hat{S}$ 是局域电子的自旋算符,它既不满足费密型对易关系,也不满足玻色型对易关系.

例二: 局域关联能 $U\to\infty$ 的 Anderson 磁性杂质模型哈密顿量为

$$\hat{V}=\sum_{k\sigma}\{V_{k}d_{k\sigma}^{+}f_{\sigma}f_{-\sigma}f_{-\sigma}^{+}+h.c\},\qquad(12.1.2)$$

其中投影算符 $f_{-\sigma}f_{-\sigma}^{+}=1-n_{-\sigma}$ 能够保证 f 能级的单独占据,即如果有自旋为 σ 的电子,则不能有自旋为 $-\sigma$ 的电子,因此 f_{σ} 算符

既不是费密子算符，也不是玻色子算符．上式中 $d^{+}_{\boldsymbol{k}\sigma}$ 是 d 能带电子的产生算符．

例三：稀土离子放在格点 ν 上，每个离子的位形用不同的量子数组 M_1、M_2、M_3、…描写．由于 $4f$ 能带电子和 $5d$ 能带电子的杂化，可使离子由 M_2 态跃迁到 M_1 态等．这个跃迁过程可以用转移算符 $X^{(\nu)}_{M_1M_2}$表示．在 $\boldsymbol{R}_\nu$ 位置上放有稀土离子的体系的哈密顿量是

$$H=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}d^{-}_{\boldsymbol{k}\sigma}d_{\boldsymbol{k}\sigma}+\sum_{\nu,M}E_M X^{(\nu)}_{MM}$$

$$+\sum_{\substack{\nu\boldsymbol{k}\sigma\\M_1M_2}}[N^{-\frac{1}{2}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_\nu}V_{\boldsymbol{k}}(\sigma M_1M_2)d^{+}_{\boldsymbol{k}\sigma}X^{(\nu)}_{M_1M_2}+\mathrm{h\cdot c}] \tag{12.1.3}$$

其中转移算符 $X^{(\nu)}_{M_1M_2}$既不满足费密型也不满足玻色型对易关系．

其它如赝自旋的金属玻璃模型，某些晶场效应等，不一一仔细列举了．由于直接统计微扰论方法不受 Wick 定理的限制，因此可以用于处理上述问题．

二、配分函数和格林函数的回路积分表示

配分函数 Z 的展开为

$$Z=\mathrm{Tr}e^{-\beta H}=\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\mathrm{Tr}\left(\frac{1}{z-H}\right), \tag{12.1.4}$$

其中回路积分包围 $1/(z-H)$ 的全体分立的和连续的奇异性．设

$$H=H_0+V \tag{12.1.5}$$

方程(12.1.4)式可改写成

$$Z=\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\mathrm{Tr}\left(\frac{1}{z-H_0}\frac{1}{1-\frac{1}{z-H_0}V}\right) \tag{12.1.6}$$

$$=\frac{1}{2\pi i}\oint dz e^{-\beta z}\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{z-H_0}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{z-H_0}V\right)^n\right]$$

(12.1.7)

无相互作用体系的配分函数 Z_0 为

$$Z_0=\mathrm{Tr}e^{-\beta H_0}=\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\cdot\mathrm{Tr}\frac{1}{z-H_0} \quad (12.1.8)$$

配分函数之差为

$$Z-Z_0=\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\mathrm{Tr}\left[\left(\frac{1}{z-H_0}\right)^2\sum_{n=1}^{\infty}V\left(\frac{1}{z-H_0}V\right)^{n-1}\right]$$

(12.1.9)

用阵迹内的算符的循环转置的不变性，可把(12.1.6)式改写成

$$Z-Z_0=\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\cdot\frac{\partial}{\partial z}\mathrm{Tr}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n}\left(\frac{1}{z-H_0}V\right)^n.$$

(12.1.10)

上式分部积分，化为

$$Z-Z_0=-\frac{\beta}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\cdot\mathrm{Tr}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\left(\frac{1}{z-H_0}V\right)^n \quad (12.1.11)$$

为了去掉(12.1.11)式中的$\frac{1}{n}$因子，形式上把 V 乘上 g 因子，并对 g 从 0 到 1 积分．易证(12.1.11)式可改写为

$$Z-Z_0=-\frac{\beta}{2\pi i}\int_0^1 dg\ \frac{1}{g}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\cdot\mathrm{Tr}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{z-H_0}gV\right)^n.$$

(12.1.12)

在多体体系中相互作用产生激发是关键的量．为了把 $Z-Z_0$ 和体系各种激发过程联系起来，引入 H_0 的本征态的完备系列

$$H_0|N\rangle=E_N|N\rangle \quad (12.1.13)$$

$$\sum_N|N\rangle\langle N|=1 \quad (12.1.14)$$

(12.1.9)式可用 H_0 的各个激发态表示为

$$Z-Z_0=\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\cdot \sum_N\left(\frac{1}{z-E_N}\right)^2$$

$$\cdot\sum_{n=1}^{\infty}\langle N|V\left(\frac{1}{z-H_0}V\right)^{n-1}|N\rangle \qquad (12.1.15)$$

移动积分原点，$z-E_N\to z$，有

$$Z-Z_0=\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\cdot \sum_N e^{-\beta E_N}\cdot\frac{1}{z^2}\sum_{n=1}^{\infty}\langle N|V$$

$$\cdot\left(\frac{1}{z+E_N-H_0}V\right)^{n-1}|N\rangle \qquad (12.1.16)$$

同理把(12.1.11)式，移动积分原点之后成为

$$Z-Z_0=-\frac{\beta}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\cdot \sum_N e^{-\beta E_N}\frac{1}{z}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\langle N|V$$

$$\cdot\left(\frac{1}{z+E_N-H_0}V\right)^{n-1}|N\rangle \qquad (12.1.17)$$

为了把(12.1.16)和(12.1.17) 式写成更紧凑的形式，定义投影算符 P_N 为

$$P_N=|N\rangle\langle N|. \qquad (12.1.18)$$

$$Q_N=1-P_N \qquad (12.1.19)$$

定义态 $|N\rangle$ 的广义自能为

$$\Sigma_N(z,g)=\langle N|gV\frac{1}{1-\frac{1}{z+E_N-H_0}Q_NgV}|N\rangle \qquad (12.1.20)$$

(12.1.16)式化为用广义自能展开的形式是:

$$Z=\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\sum_N e^{-\beta E_N}\cdot\frac{1}{z-\Sigma_N(z,1)}. \qquad (12.1.21)$$

(12.1.16)式化为(12.1.21)式的条件是

$$|\Sigma_N(z,g)|<|z|. \qquad (12.1.22)$$

以下证明(12.1.21)式. 由于(12.1.22)式成立，可以把(12.1.21)式写成展开的形式.

$$Z=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\sum_{N}\mathrm{e}^{-\beta E_N}\cdot\frac{1}{z}\cdot\frac{1}{1-\dfrac{\Sigma_N(z,1)}{z}}$$

$$=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\sum_{N}\mathrm{e}^{-\beta E_N}\left\{\frac{1}{z}+\frac{\Sigma_N(z,1)}{z^2}+\frac{[\Sigma_N(z,1)]^2}{z^3}+\cdots\right\}$$

$$=Z_0+\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\sum_{N}\mathrm{e}^{-\beta E_N}\left\{\frac{\Sigma_N(z,1)}{z^2}+\frac{[\Sigma_N(z,1)]^2}{z^3}+\cdots\right\}$$

$$=Z_0+\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\sum_{N}\mathrm{e}^{-\beta E_N}\cdot\frac{1}{z^2}\cdot\left\{\Sigma_N(z,1)+\frac{[\Sigma_N(z,1)]^2}{z}+\cdots\right\}\qquad(12.1.23)$$

把广义自能定义式(12.1.20)代入到(12.1.23)中，有

$$Z=Z_0+\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\sum_{N}\mathrm{e}^{-\beta E_N}\cdot\frac{1}{z^2}$$

$$\left\{\langle N|V\left[1+\frac{1}{z+E_N-H_0}(1-P_N)V+\frac{1}{z+E_N-H_0}(1-P_N)V\cdot\frac{1}{z+E_N-H_0}(1-P_N)V+\cdots\right]|N\rangle\right.$$

$$+\frac{1}{z}\left[\langle N|V\left[1+\frac{1}{z+E_N-H_0}(1-P_N)V+\frac{1}{z+E_N-H_0}(1-P_N)V\right.\right.$$

$$\left.\left.\left.\frac{1}{z+E_N-H_0}(1-P_N)V+\cdots\right]|N\rangle\right]^2+\cdots\right\}$$

$$=Z_0+\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\sum_{N}\mathrm{e}^{-\beta E_N}\frac{1}{z^2}.$$

$$\left\{\left[\langle N|V|N\rangle+\sum_{N'(\neq N)}\langle|N|V|N'\rangle\langle N'|\frac{1}{z+E_N-H_0}V|N\rangle+\cdots\right]\right.$$

$$+\frac{1}{z}[(\langle N|V|N\rangle)^2+2\langle N|V|N\rangle\sum_{N'(\neq N)}\langle N|V|N'\rangle$$

$$\cdot\frac{1}{z+E_N-E_{N'}}$$

$$\left.\langle N'|V|N\rangle+\cdots]+\cdots\right\}$$

$$=Z_0+\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot e^{-\beta z}\cdot\sum_N\mathrm{e}^{-\beta E_N}\cdot\frac{1}{z^2}\left\{\langle N|V|N\rangle+\right.$$

$$\left.+\left\langle N|V\frac{1}{z+E_N-H_0}V|N\right\rangle+\cdots\right\}\tag{12.1.24}$$

其中第二项是上一等式中之第一大项中之第二项和第二大项中的第一项之和. 仿此可逐项得出(12.1.16)式中的各项.

用同样的办法也可证(12.1.17)式可化为

$$Z-Z_0=-\beta\int_0^1\mathrm{d}g\cdot\frac{1}{g}\cdot\oint\frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\sum_N\mathrm{e}^{-\beta E_N}\frac{\sum_{N(z,g)}}{z-\sum_{N(z,g)}}\tag{12.1.25}$$

格林函数也可用回路积分表示为

$$G_{AB}(\tau)=-\langle TA(\tau)B\rangle$$

$$\equiv\begin{cases}-\dfrac{1}{Z}\cdot\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{-(\beta-\tau)H}A\mathrm{e}^{-\tau H}B], & \tau>0\\ \pm\dfrac{1}{Z}\mathrm{Tr}[\mathrm{e}^{-(\beta+\tau)H}B\mathrm{e}^{\tau H}A] & \tau<0\end{cases}\tag{12.1.26}$$

其中+号对应A和B都是费密算符. $G_{AB}(\tau)$的傅氏变换

$$G_{AB}(\mathrm{i}\omega_n)=\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}G_{AB}(\tau),\tag{12.1.27}$$

其中含有 Matsubara 频率

$$\omega_n=\begin{cases}(2n+1)\pi/\beta, & A\text{和}B\text{都是费密算符}\\ 2n\pi/\beta, & \text{其它}\end{cases}\tag{12.1.28}$$

把(12.1.26)式中的$G_{AB}(\tau)$的指数因子用回路积分表示, 得到

$$G_{AB}(\mathrm{i}\omega_n)=\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}\frac{1}{(2\pi\mathrm{i})^2}\cdot\oint \mathrm{d}z\mathrm{e}^{-(\beta-\tau)z}\cdot\oint \mathrm{d}z'\mathrm{e}^{-\tau z'}$$

$$\left[-\frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left(\frac{1}{z-H}A\frac{1}{z'-H}B\right)\right]$$

$$=\frac{-1}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\frac{1}{Z}\cdot\oint \mathrm{d}z\oint \mathrm{d}z'\frac{\mp\mathrm{e}^{-\beta z'}-\mathrm{e}^{-\beta z}}{\mathrm{i}\omega_n+z-z'}\mathrm{Tr}\left(\frac{1}{z-H}A\frac{1}{z'-H}B\right) \tag{12.1.29}$$

其中负号用于A和B都是费密算符，对z和z'的积分回路分别环绕$1/(z-H)$和$1/(z'-H)$的奇点. 方法是对含$\mathrm{e}^{-\beta z'}$和$\mathrm{e}^{-\beta z}$的因子的项，分别完成对z和z'的回路积分，并且把得到的含z'的回路积分中的被积表达式移动积分原点，得出

$$G_{AB}(\mathrm{i}\omega_n)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}Z}\oint \mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}$$

$$\cdot\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{z-H}A\frac{1}{z+\mathrm{i}\omega_n-H}B\right] \tag{12.1.30}$$

其中回路积分环绕$1/(z-H)$和$1/(z-H+\mathrm{i}\omega_n)$的奇点. (12.1.30)式也可用$V$展开

$$G_{AB}(\mathrm{i}\omega_n)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint \mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{z-H_0}\sum_{l=0}^{\infty}\left(V\frac{1}{z-H_0}\right)^l A\right.$$

$$\left.\frac{1}{z+\mathrm{i}\omega_n-H_0}\sum_{m=0}^{\infty}\left(V\frac{1}{z+\mathrm{i}\omega_n-H_0}\right)^m B\right]. \tag{12.1.31}$$

用H_0的本征态可以把(12.1.30)式表示为

$$G_{AB}(i\omega_n)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}Z}\oint \mathrm{d}z\frac{\mathrm{e}^{-\beta z}}{z}\sum_{N_1N_2N_3N_4}\mathrm{e}^{-\beta E_{N_1}}\sum_{l,m=0}^{\infty}$$

$$\left\langle N_1\left|\left[V\frac{1}{z+E_{N_1}-H_0}\right]^l\right|N_2\right\rangle\langle N_2|A|N_3\rangle\frac{1}{z+E_{N_1}-E_{N_3}+\mathrm{i}\omega_n}$$

$$\left\langle N_3\left|\left[V\frac{1}{z+E_{N_1}+\mathrm{i}\omega_n-H_0}\right]^m\right|N_4\right\rangle\langle N_4|B|N_1\rangle. \tag{12.1.32}$$

由于上式含有A和B的非对角矩阵元，因而不能用(12.1.20)式的广义自能写成简单的形式.

值得指出的是以上得到的一些公式都不涉及相互作用哈密顿量的具体形状

三、配分函数的图解规则

不同的哈密顿量将有不同的图解规则. 做为一个例子，以局域关联能$U\to\infty$的 Anderson 磁性杂质模型为例. 这时有d能带电子和f能级局域电子的相互作用.

$$H_0=\sum_{k\sigma}\varepsilon_{k\sigma}d_{k\sigma}^{+}d_{k\sigma}+\sum_{\sigma}\varepsilon_{f\sigma}f_{\sigma}^{+}f_{\sigma}$$
$$V=\sum_{k\sigma}\{V_k d_{k\sigma}^{+}f_{\sigma}f_{-\sigma}f_{-\sigma}^{+}+\mathrm{h\cdot c}\} \tag{12.1.33}$$

投影算符$f_{-\sigma}f_{-\sigma}^{+}$使$f$能级只有三个可能的占据态: $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$和$|\downarrow\rangle$. 用Z_0除(12.1.16)式双方，得出

$$\frac{Z}{Z_0}=1+\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint \mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\frac{1}{z^2}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{N}\mathrm{e}^{-\beta E_N}$$
$$\left\langle N\left|V\left(\frac{1}{z+E_N-H_0}V\right)^k\right|N\right\rangle\frac{1}{Z_0} \tag{12.1.34}$$

其中第一个不为 0 的修正项是$k=1$，用$Z^{(2)}/Z_0$表示.

$$\frac{Z^{(2)}}{Z_0}=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint \mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\frac{1}{z^2}\sum_{N}\mathrm{e}^{-\beta E_N}\left\langle N\left|V\frac{1}{z+E_N-H_0}V\right|N\right\rangle\frac{1}{Z_0}$$
$$=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint \mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\frac{1}{z^2}\sum_{N}\mathrm{e}^{-\beta E_N}\sum_{N'}\langle N|V|N'\rangle$$
$$\frac{1}{z+E_N-E_{N'}}\langle N'|V|N\rangle\frac{1}{Z_0}. \tag{12.1.35}$$

把(12.1.33)的V的表达式代入(12.1.35)，可得到四项. 为了使$\langle N|V|N'\rangle$和$\langle N'|V|N\rangle$同时为不为 0，只剩下两项如下:

$$\frac{Z^{(2)}}{Z}=\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\cdot\frac{1}{z^{2}}\left\{\sum_{N}e^{-\beta E_{N}}\sum_{N'}\left\langle N\left|\sum_{k'\sigma'}V_{k'}d^{+}_{k'\sigma'}f_{\sigma'}\right.\right.\right.$$

$$\left.f_{-\sigma'}f^{+}_{-\sigma'}\middle|N'\right\rangle\frac{1}{z+E_{N}-E_{N'}}\left\langle N'\left|\sum_{k\sigma'}V^{*}_{k}d_{k\sigma}f^{+}_{\sigma}f^{+}_{-\sigma}f_{-\sigma}\right|N\right\rangle$$

$$+\sum_{N}e^{-\beta E_{N}}\sum_{N'}\left\langle N\left|\sum_{k'\sigma'}V^{*}_{k'}d_{k'\sigma'}f^{+}_{\sigma'}f^{+}_{-\sigma'}f_{-\sigma}\right|N'\right\rangle\frac{1}{z+E_{N}-E_{N'}}$$

$$\left.\left\langle N'\left|\sum_{k\sigma}V_{k}d^{+}_{k\sigma}f_{\sigma}f_{-\sigma}f^{+}_{-\sigma}\right|N\right\rangle\right\}\frac{1}{Z_{0}}. \tag{12.1.36}$$

矩阵元不为零的要求使上式中第一项的$|N|\rangle$和$|N'\rangle$为

$$\begin{aligned}|N'\rangle&=|n_{f\sigma}=1\rangle|n_{k\sigma}=0\rangle|N_{rest}\rangle,\\|N\rangle&=|n_{f\sigma}=0\rangle|n_{k\sigma}=1\rangle|N_{rest}\rangle.\end{aligned} \tag{12.1.37}$$

(12.1.36)式第二项的$|N\rangle$和$|N'\rangle$为

$$\begin{aligned}|N\rangle&=|n_{f\sigma}=1\rangle|n_{k\sigma}=0\rangle|N_{rest}\rangle\\|N'\rangle&=|n_{f\sigma}=0\rangle|n_{k\sigma}=1\rangle|N_{rest}\rangle\end{aligned} \tag{12.1.38}$$

所以(12.1.36)式可化为

$$\frac{Z^{(2)}}{Z_{0}}=\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\,\frac{1}{z^{2}}\sum_{k\sigma}|V_{k}|^{2}$$

$$\left\{\sum_{N_{rest}}\langle N_{rest}|e^{-\beta\sum\limits_{k\sigma'(\neq k\sigma)}\varepsilon_{k\sigma'}d^{+}_{k\sigma'}d_{k\sigma'}}\quad\langle n_{k\sigma}=1|e^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}d^{+}_{k\sigma}d_{k\sigma}}\right.$$

$$\cdot\left\langle n_{f\sigma}=0\left|e^{-\beta\sum\limits_{\sigma}\varepsilon_{f\sigma}f^{+}_{\sigma}f_{\sigma}}\right.d^{+}_{k\sigma}f_{\sigma}f_{-\sigma}f^{+}_{-\sigma}|n_{+\sigma}=1\right\rangle$$

$$\times|n_{k\sigma}=0\rangle\,|N_{rest}\rangle\,\frac{1}{z+\varepsilon_{k\sigma}-\varepsilon_{f\sigma}}\langle N_{rest}|\langle n_{f\sigma}=1|$$

$$\langle n_{k\sigma}=0|d_{k\sigma}f^{+}_{\sigma}f^{+}_{-\sigma}f_{-\sigma}|n_{f\sigma}=0\rangle|n_{k\sigma}=1\rangle|N_{rest}$$

$$+\sum_{N_{rest}}\langle N_{rest}|e^{-\beta\sum\limits_{k'\sigma'(\neq k\sigma)}\varepsilon_{k'\sigma'}d^{+}_{k'\sigma'}d_{k'\sigma'}}\quad\langle n_{k\sigma}=0\rangle$$

$$|\,e^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}d^{+}_{k\sigma}d_{k\sigma}}\langle n_{f\sigma}=1|\;e^{-\beta\sum\limits_{\sigma}\varepsilon_{f\sigma}f^{+}_{\sigma}f_{\sigma}}\,d_{k\sigma}f^{+}_{\sigma}f^{+}_{-\sigma}f_{-\sigma}|n_{f\sigma}=0\rangle$$

$$|n_{k\sigma}=1\rangle|N_{\text{rest}}\rangle\frac{1}{z-\varepsilon_{k\sigma}+\varepsilon_{f\sigma}}\times\langle N_{\text{rest}}|\langle n_{f\sigma}=0|$$

$$\langle n_{k\sigma}=1|d^+_{k\sigma}f_\sigma f_{-\sigma}f^+_{-\sigma}|n_{f\sigma}=1\rangle|n_{k\sigma}=0\rangle|N_{\text{rest}}\rangle\Big\}\cdot$$

$$\times\frac{1}{\sum_{N_{\text{rest}}}\left\langle N_{\text{rest}}\left|\mathrm{e}^{-\beta\sum_{k'\sigma'(\neq k\sigma)}\varepsilon_{k'\sigma'}d^+_{k'\sigma'}d_{k'\sigma'}}\right|N_{\text{rest}}\right\rangle\sum_{n_{k\sigma}}\langle n_{k\sigma}|\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}d^+_{k\sigma}d_{k\sigma}}|_{k\sigma}\rangle}$$

$$\cdot\frac{1}{\left\{\left\langle n_{f\uparrow}=0n_{f\downarrow}=0\left|\mathrm{e}^{-\beta\sum_\sigma\varepsilon_{f\sigma}f^+_\sigma f_\sigma}\right|n_{f\uparrow}=0n_{f\downarrow}=0\right\rangle+\langle n_{f\downarrow}=0n_{f\uparrow}=1|\mathrm{e}^{-\beta\sum_\sigma\varepsilon_{f\sigma}f^+_\sigma f_\sigma}|n_{f\downarrow}=0n_{f\uparrow}=1\rangle+\langle n_{f\downarrow}=1n_{f\uparrow}=0|\mathrm{e}^{-\beta\sum_\sigma\varepsilon_{f\sigma}f^+_\sigma f_\sigma}|n_{f\downarrow}=0n_{f\uparrow}=1\rangle\right.}$$

$$=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\frac{1}{z^2}\sum_{k\sigma}|V_k|^2$$

$$\cdot\left\{\frac{1}{z+\varepsilon_{k\sigma}-\varepsilon_{f\sigma}}\frac{\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}}}{1+\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}}}\frac{1}{1+\sum_\sigma\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{f\sigma}}}\right.$$

$$\left.+\frac{1}{z-\varepsilon_{k\sigma}+\varepsilon_{f\sigma}}\frac{1}{1+\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}}}\frac{\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{f\sigma}}}{1+\sum_\sigma\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{f\sigma}}}\right\}$$

$$=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\frac{1}{z^2}\cdot\sum_{k\sigma}|V_k|^2\cdot\left\{\frac{P_0f_{k\sigma}}{z+\varepsilon_{k\sigma}-\varepsilon_{f\sigma}}+\frac{P_\sigma(1-f_{k\sigma})}{z-\varepsilon_{k\sigma}+\varepsilon_{f\sigma}}\right\}.\tag{12.1.39}$$

也可以用以下的更加简单一些的方法导出(12.1.39)式. 以下方法的特点是不必插入中间态. 从(12.1.34)式看出

$$\frac{Z^{(2)}}{Z_0}=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\frac{1}{z^2}\cdot\sum_N\mathrm{e}^{-\beta E_N}\left\langle N\left|V\frac{1}{z+E_N-H_0}V\right|N\right\rangle\frac{1}{Z_0}\tag{12.1.40}$$

把(12.1.33)式的 V 的表达式代入上式，有

$$\frac{Z^{(2)}}{Z_0}=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint \mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\frac{1}{z^2}\sum_N \mathrm{e}^{-\beta E_N}\left\langle N\right|\left[\sum_{k\sigma}V_k d^+_{k\sigma}f_\sigma f_{-\sigma}f^+_{-\sigma}\right.$$

$$\left.+\sum_{k\sigma}V^*_k d_{k\sigma}f_{-\sigma}f^+_{-\sigma}f^+_\sigma\right]\frac{1}{z+E_N-H_0}\left[\sum_{k'\sigma'}V_{k'}d^+_{k'\sigma'}f_{\sigma'}f_{-\sigma'}f^+_{-\sigma'}\right.$$

$$\left.+\sum_{k'\sigma'}V^*_{k'}d_{k'\sigma'}f_{-\sigma'}f^+_{-\sigma'}f^+_{\sigma'}\right]\left|N\right\rangle\frac{1}{Z_0}$$

$$=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint \mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\frac{1}{z^2}\sum_N \mathrm{e}^{-\beta E_N}\sum_{k\sigma}|V_k|^2$$

$$\cdot\left\{\left\langle N\right|d^+_{k\sigma}f_\sigma f_{-\sigma}f^+_{-\sigma}\frac{1}{z+E_N-H_0}d_{k\sigma}f_{-\sigma}f^+_{-\sigma}f^+_\sigma\left|N\right\rangle\right.$$

$$\left.+\left\langle N\right|d^+_{k\sigma}f_{-\sigma}f^+_{-\sigma}f^+_\sigma\frac{1}{z+E_N-H_0}d^+_{k\sigma}f_\sigma f_{-\sigma}f^+_{-\sigma}\left|N\right\rangle\right\}\frac{1}{Z_0^{\text{band}}Z_0^f}. \tag{12.1.41}$$

可以看出上式第一大项的能量分母为$\frac{1}{z+\varepsilon_{k\sigma}-\varepsilon_{f\sigma}}$，第二大项的能量分母为$\frac{1}{z-\varepsilon_{k\sigma}+\varepsilon_{f\sigma}}$. 第一大项的计算如下.

$$\sum_N \mathrm{e}^{-\beta E_N}\langle N|d^+_{k\sigma}f_\sigma f_{-\sigma}f^+_{-\sigma}d_{k\sigma}f_{-\sigma}f^+_{-\sigma}f^+_{-\sigma}|N\rangle\frac{1}{Z_0^{\text{band}}Z_0^f}$$

$$=\sum_{N_{\text{rest}}}\left\langle N_{\text{rest}}\right|\mathrm{e}^{-\beta\sum\limits_{k'\sigma'(\neq k\sigma)}\varepsilon_{k'\sigma'}d^+_{k'\sigma'}d_{k'\sigma'}}\left|N_{\text{rest}}\right\rangle\langle n_{k\sigma}=1|$$

$$\times\ \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}d^+_{k\sigma}d_{k\sigma}}|n_{k\sigma}=1\rangle$$

$$\left\langle n_{f\sigma}=0\right|\mathrm{e}^{-\beta\sum\limits_\sigma\varepsilon_{f\sigma}f^+_\sigma f_\sigma}\left|n_{f\sigma}=0\right\rangle$$

$$\times\frac{1}{\sum\limits_{N_{\text{rest}}}\left\langle N_{\text{rest}}\right|\mathrm{e}^{-\beta\sum\limits_{k'\sigma'(\neq k\sigma)}\varepsilon_{k'\sigma'}d^+_{k'\sigma'}d_{k'\sigma'}}\left|N_{\text{rest}}\right\rangle}$$

$$\cdot \frac{1}{\langle n_{k\sigma}=0|\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}d_{k\sigma}^{+}d_{k\sigma}}|n_{k\sigma}=0\rangle+\langle n_{k\sigma}=1|\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}d_{k\sigma}^{+}d_{k\sigma}}|n_{k\sigma}=1\rangle}$$

$$\cdot \frac{1}{1+\left\langle n_{f\uparrow}=1|\,\mathrm{e}^{-\beta\sum\limits_{\sigma}\varepsilon_{f\sigma}f_{\sigma}^{+}f_{\sigma}}|n_{f\uparrow}=1\right\rangle+\left\langle n_{f\downarrow}=1|\,\mathrm{e}^{-\beta\sum\limits_{\sigma}\varepsilon_{f\sigma}f_{\sigma}^{+}f_{\sigma}}|n_{f\downarrow}=1\right\rangle}$$

$$=\frac{\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}}}{1+\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}}}\frac{1}{1+\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{f\uparrow}}+\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{f\downarrow}}} \tag{12.1.42}$$

第二大项的计算如下：

$$\sum_{N}\mathrm{e}^{-\beta E_N}\left\langle N\left|\, d_{k\sigma}f_{-\sigma}f_{-\sigma}^{+}f_{\sigma}^{+}\frac{1}{z+E_N-H_0}d_{k\sigma}^{+}f_{\sigma}f_{-\sigma}f_{-\sigma}^{+}\right|N\right\rangle$$

$$\cdot\frac{1}{Z_0^{\mathrm{band}}\ Z_0^{+}}=\frac{1}{1+\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{k\sigma}}}\frac{\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{+\sigma}}}{1+\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{f\uparrow}}+\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_{f\downarrow}}}. \tag{12.1.43}$$

把(12.1.42)和(12.1.43)代入到(12.1.41)式中，即可得出(12.1.38)式.

以下证明(12.1.39)式中的 $1/z^2$ 可用 $-\beta/2z$ 替换，即

$$\frac{Z^{(2)}}{Z_0}=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\frac{-\beta}{2z}$$

$$\cdot\sum_{k\sigma}|V_k|^2\left(\frac{P_0 f_{k\sigma}}{z+\varepsilon_{k\sigma}-\varepsilon_{f\sigma}}+\frac{P_\sigma(1-f_{k\sigma})}{z-\varepsilon_{k\sigma}+\varepsilon_{f\sigma}}\right) \tag{12.1.44}$$

为了证明(12.1.44)和(12.1.39)式相等，先把(12.1.44)式改写成

$$\frac{Z^{(2)}}{Z_0}=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\mathrm{e}^{-\beta z}\frac{\partial}{\partial z}\left(-\frac{1}{z}\right)\frac{1}{z}\sum_{k\sigma}|V_k|^2\left(\frac{P_0 f_{k\sigma}}{z+\varepsilon_{k\sigma}-\varepsilon_{f\sigma}}\right.$$

$$\left.+\frac{P_\sigma(1-f_{k\sigma})}{z-\varepsilon_{k\sigma}+\varepsilon_{f\sigma}}\right). \tag{12.1.45}$$

上式可化为

$$
\frac{Z^{(2)}}{Z_0}=\frac{1}{2\pi i}\oint dz e^{-\beta z}\left(-\frac{1}{2}\right)\Bigg\{\frac{-1}{z^2}\sum_{k\sigma}|V_k|^2\frac{P_0 f_{k\sigma}}{z+\epsilon_{k\sigma}-\epsilon_{f\sigma}}
$$

$$
+\frac{1}{z}\sum_{k\sigma}|V_k|^2\frac{P_0 f_{k\sigma}(-1)}{(z+\epsilon_{k\sigma}-\epsilon_{f\sigma})^2}-\frac{1}{z^2}\sum_{k\sigma}|V_k|^2\frac{P_\sigma(1-f_{k\sigma})}{z-\epsilon_{k\sigma}+\epsilon_{f\sigma}}
$$

$$
+\frac{1}{z}\sum_{k\sigma}|V_k|^2\frac{P_\sigma(1-f_{k\sigma})(-1)}{(z-\epsilon_{k\sigma}+\epsilon_{f\sigma})^2}. \tag{12.1.46}
$$

把(12.1.46)式中的第二和第四项分别做变数变换：$\tilde{z}=z+\epsilon_{k\sigma}-\epsilon_{f\sigma}$ 及 $\tilde{z}=z-\epsilon_{k\sigma}+\epsilon_{f\sigma}$，然后去掉～，第一和第四项可以合并，第二和第三项可以合并，就可以得出(12.1.39)式.

以下证明(12.1.44)式中的两项相等. 为此把第二项做变数变换 $\tilde{z}=z-\epsilon_{k\sigma}+\epsilon_{f\sigma}$，有

$$
\frac{1}{2\pi i}\oint dz(-\beta)\sum_{k\sigma}e^{-\beta(\tilde{z}+\epsilon_{k\sigma}-\epsilon_{f\sigma})}|V_k|^2P_\sigma(1-f_{k\sigma})
$$

$$
\cdot\frac{1}{\tilde{z}+\epsilon_{k\sigma}-\epsilon_{f\sigma}}\frac{1}{2\tilde{z}}=\frac{1}{2\pi i}\oint d\tilde{z}\cdot e^{-\beta\tilde{z}}\cdot(-\beta)
$$

$$
\cdot\sum_{k\sigma}|V_k|^2\cdot P\cdot f_{k\sigma}\cdot\frac{1}{\tilde{z}+\epsilon_{k\sigma}-\epsilon_{f\sigma}}\cdot\frac{1}{\tilde{z}}\cdot\frac{1}{2}
$$

＝第二项.

(12.1.39)或(12.1.44)式的两项也可以用图表示(图 12-1).

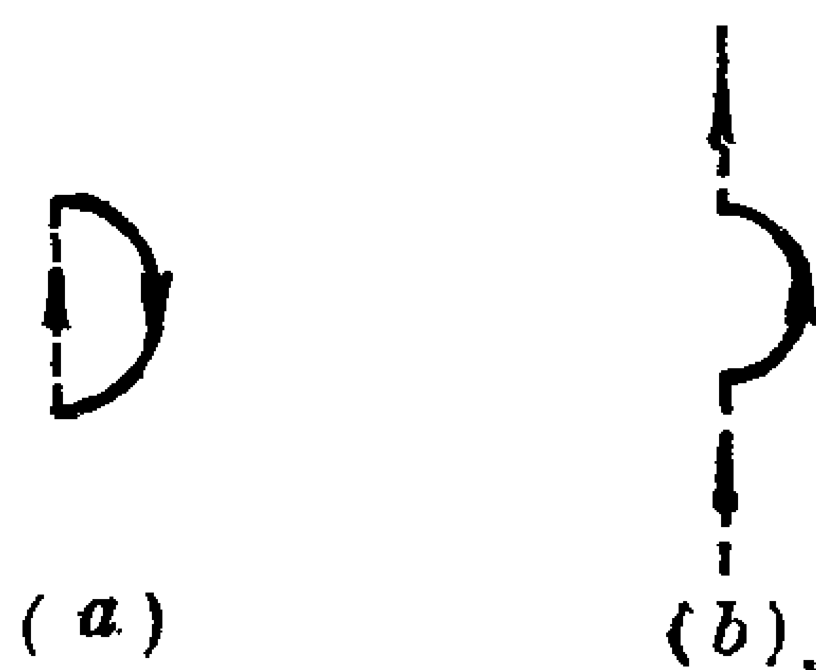


图 12.1　$U\to\infty$ Anderson杂质模型二级图：
a：初态无$f\sigma$电子；b：初态有 $f\sigma$ 电子.

以(12.1.39)为例的图 12-1 和表达式对应规则是：

1. 都有回路积分因子，$\frac{1}{2\pi i}\oint dz e^{-\beta z}\frac{1}{z^2}$.

2. 在图形中做一水平线，此水平线将和图形中已有的相交。交线中箭头向上（下）的在能量分母的贡献为负（正），箭头向上（下）的实线代表$(1-f_{k\sigma})(f_{k\sigma})$，初态无（有）$f\sigma$ 电子对应 $P_0(P_\sigma)$.

3. $f\sigma$ 电子对应的虚线的箭头总是向上，这是因为每个位置只能有一个 f 电子，允许传导电子的实线的箭头可上可下，规定 f 电子的虚线的箭头只能向上.

为了核对以上的图解规则及找全图解规则，用导出(12.1.44)式的办法，推导四级修正. 按公式(12.1.34)可以写出

$$\begin{aligned}\frac{Z^{(4)}}{Z_0}=&\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\cdot\frac{1}{z^2}\cdot\sum_N e^{-\beta E_N}\left\langle N\left|V\frac{1}{z+E_N-H_0}V\right.\right.\\&\cdot\frac{1}{z+E_N-H_0}V\frac{1}{z+E_N-H_0}V\left|N\right\rangle\frac{1}{Z_0}\\=&\frac{1}{2\pi i}\oint dz\cdot e^{-\beta z}\cdot\frac{1}{z^2}\cdot\sum_N e^{-\beta E_N}\\&\cdot\left\langle N\left|\left[\sum_{k_1\sigma_1}V_{k_1}d^+_{k_1\sigma_1}f_{\sigma_1}+\sum_{k_1\sigma_1}V^*_{k_1}d_{k_1\sigma_1}f^+_{\sigma_1}\right]\frac{1}{z+E_N-H_0}\right.\right.\\&\times\left[\sum_{k_2\sigma_2}V_{k_2}d^+_{k_2\sigma_2}f_{\sigma_2}+\sum_{k_2\sigma_2}V^*_{k_2}d_{k_2\sigma_2}f_{\sigma_2}\right]\frac{1}{z+E_N-H_0}\\&\times\left[\sum_{k_3\sigma_3}V_{k_3}d^+_{k\sigma_3}f_{\sigma_3}+\sum_{k_3\sigma_3}V^*_{k_3}d_{k_3\sigma_3}f^+_{\sigma_3}\right]\frac{1}{z+E_N-H_0}\\&\times\left[\sum_{k_4\sigma_4}V_{k_4}d^+_{k_4\sigma_4}f_{\sigma_4}+\sum_{k_4\sigma_4}V^*_{k_4}d_{k_4\sigma_4}f^+_{\sigma_4}\right]\left|N\right\rangle\frac{1}{Z_0}.\end{aligned}\tag{12.1.47}$$

(12.1.47) 式共有十六项，但只有四项不为 0. 为了找出这四项，应当注意到每个杂质位置最多只能有一个 f 电子，即初态的 f 能级只有两种占据的可能：占据一个 f 电子或者是没有 f 电子占据. 如果把四个相互作用用四点实心圆点表示，则 f 电子的虚线，只有两种可能.

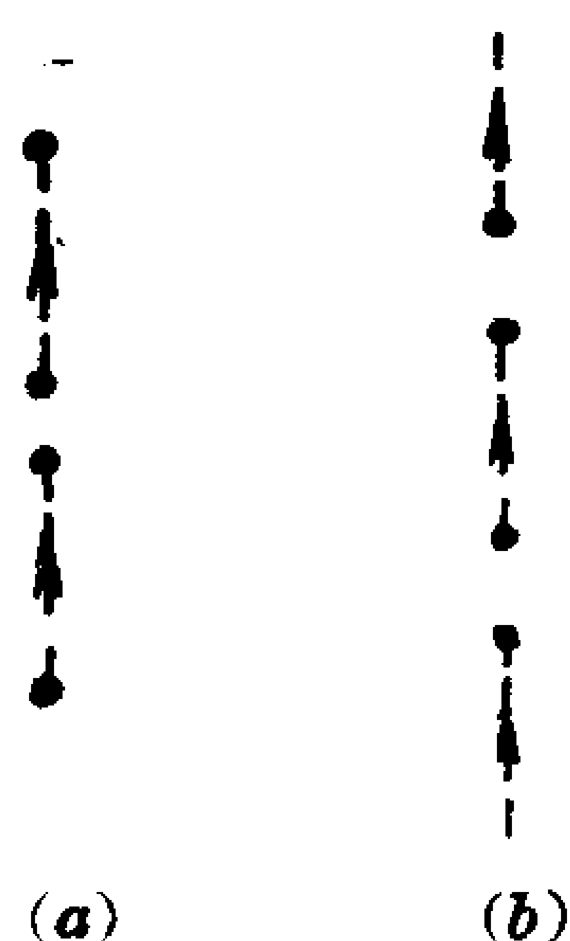


图 12.2　Anderson 杂质模型配分函数四级图的 f 电子部分的连线图：a. 初态无 f 电子；b：初态有 f 电子

再注意到V 的特点，知有一虚线出(入)圆点，则必有实线入(出)圆点. 按此原则，图 12.2 中补上实线成为图 12.3 应当说明的是：虽

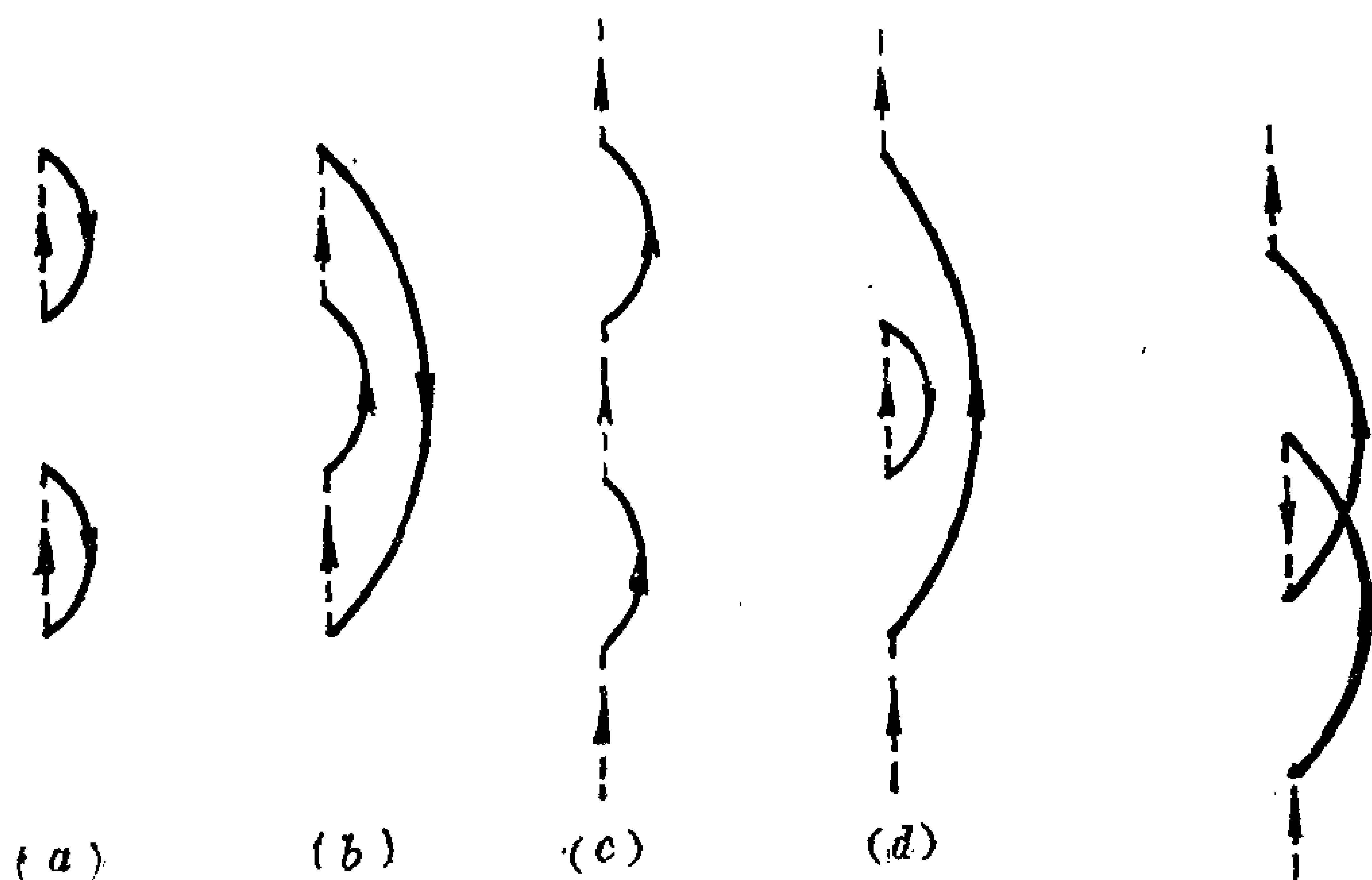


图 12.3　Anderson杂质模型配分函数四级图

图 12.4　不合理的 Anderson 杂质模型图

然我们也可画出图 12.4 所示的图，即这个图是符合 Anderson 哈密顿量V 的结构的. 但是由于这个图中的 f 电子线的箭头在相邻两个圆点之间同时指向圆点或同时离开圆点，因而违反了每一 f 能级只能最多有一个 f 电子占据的物理要求，所以这个图不合理. 按着图 12-3 的结构，在表达式(12.1.47)中找出相应的项，得到

$$
\frac{Z^{(4)}}{Z_0}=\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\oint \mathrm{d}z\cdot \mathrm{e}^{-\beta z}
$$

$$
\begin{aligned}
\cdot\frac{1}{z^2}\sum_{k\sigma k'}|V_k|^2|V_{k'}|^2\Bigg[&P_0\frac{f_{k\sigma}f_{k'\sigma'}}{(z-\epsilon_{f\sigma}+\epsilon_{k\sigma})z(z-\epsilon_{f\sigma'}+\epsilon_{k'\sigma'})}\\
&+P_0\frac{f_{k\sigma}(1-f_{k'\sigma})}{(z-\epsilon_{f\sigma}+\epsilon_{k\sigma})^2(z-\epsilon_{k'\sigma}+\epsilon_{k\sigma})}\\
&+P_\sigma\frac{(1-f_{k\sigma})(1-f_{k'\sigma})}{(z+\epsilon_{f\sigma}-\epsilon_{k\sigma})z(z+\epsilon_{f\sigma}-\epsilon_{k'\sigma})}\\
&+P_\sigma\sum_{\sigma'}\frac{(1-f_{k\sigma})f_{k'\sigma'}}{(z+\epsilon_{f\sigma}-\epsilon_{k\sigma})^2(z+\epsilon_{f\sigma}-\epsilon_{f\sigma'}+\epsilon_{k'\sigma'}-\epsilon_{k\sigma})}\Bigg].
\end{aligned}
\tag{12.1.48}
$$

可以证明上式中的 $1/z^2$，可以用 $-\beta/4z$ 替换，相当于用(12.1.17)式写出四级项.

写更高阶的 V 展开项时，要注意符号，例如图 12.5 所表达的一个六级项. 这个图的特点是出现实线的交义



图 12.5 Anderson 杂质模型六级图

交义点是奇数个，相当于表达式中 d 算符调动奇数次.

$$
d_1\, d_2^+\, d_3\, d_4^+\, d_5\, d_6^+=-\delta_{14}\delta_{25}\delta_{36}f_1(1-f_2)f_3. \tag{12.1.49}
$$

把表达式(12.1.49)以 d_1 为原点,形式上逆时针转动 90°,则表达式附加的连线正好和图 12-5 的实线重合. 把(12.1.49)式中连线的算调动到一起,总的调动次数正是奇数次,因此出现负号.

把 $2n$ 级图的图解规则总结如下:

1. 在垂直方向画 $2n$ 个点,初始 f 能级的虚线有两种画法,如果初始 f 能级被占据,则用有向上箭头的虚线指向最下面的点(相应地在最上面的圆点有虚线的箭头开圆点). 如果初始 f 能级不被占据,则在最下面的点向上画一条箭头离开此点的虚线、在所有点的虚线的箭头都是向上的.

2. 用都在同一侧的实线联接各个点. 实线上的箭头要和虚线上的箭头对圆点来说,要形成一出(入),一入(出)的关系.

3. 实线标 $\boldsymbol{k}\sigma$,虚线标 σ,每一个点有自旋守恒.

4. 上行实线为 $|V_{\boldsymbol{k}}|^2(1-f_{\boldsymbol{k}\sigma})$,下行实线为 $|V_{\boldsymbol{k}}|^2 f_{\boldsymbol{k}\sigma}$. 两点之间有能量分母: ($z-$ 上行线能量 $+$ 下行线能量 $+$ 初始 f 态能量).

5. 对内部变量求和.

6. 乘上初始 f 态占据几率

7. 乘上 $(-1)^c$,c 为交义实线数.

8. 取回路积分 $\dfrac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint \mathrm{d}z\cdot \mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\dfrac{1}{z^2}$ 或 $\dfrac{-\beta}{2\pi\mathrm{i}}\dfrac{1}{2n}\oint \mathrm{d}z\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\dfrac{1}{z}$ (后一表达式中的 $2n$ 因子可用对“耦合常数”的积分表达,见(12.1.12)式).

计算时要注意在用展开式(12.1.11)式时,有些图的大小相等,即其表达式可变换为相同的形式. 例如在(12.1.47)中,用 $-\beta/4z$ 代替 $1/z^2$,令第四项的 $z=\tilde{z}-\epsilon_{f\sigma}+\epsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}$,则第四项成为

$$\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int \mathrm{d}\tilde{z} \sum_{\boldsymbol{k}\sigma\boldsymbol{k}'\sigma'} |V_{\boldsymbol{k}}|^2 |V_{\boldsymbol{k}'}|^2 \mathrm{e}^{-\beta(\tilde{z}-\varepsilon_{f\sigma}+\varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma})} \cdot\frac{-\beta P_\sigma(1-f_{\boldsymbol{k}\sigma})f_{\boldsymbol{k}'\sigma'}}{4\tilde{z}^2(\tilde{z}-\varepsilon_{f\sigma'}+\varepsilon_{\boldsymbol{k}'\sigma'})(\tilde{z}-\varepsilon_{f\sigma}+\varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma})}$$

$$=\frac{1}{2\pi i}\oint dz e^{-\beta z}\sum_{k\sigma k'\sigma'}\frac{-\beta}{4}|V_k|^2|V_{k'}|^2$$

$$\times\frac{P_0 f_{k\sigma}f_{k'\sigma'}}{\tilde{z}^2(\tilde{z}-\epsilon_{f\sigma'}+\epsilon_{k'\sigma'})(\tilde{z}-\epsilon_{f\sigma'}+\epsilon_{k'\sigma'})}$$

$$=(12.1.48)\text{的第一项}$$

类似的方法可以证明第二和第三项全同，所以在计算时可以只计算图 12.3 的 a 和 b 两个图的表达式，然后乘以 2.

从拓扑上来看，相等的图可由顶点的循环转置得到，在更高级的图也有同样的相等关系. 如果对 $2n$ 级图的 $2n$ 个顶点做 $2n$ 次相继的循环转置，则得到图形的族. 族中的全体图形都相等. 这里有两种情形的区别. 以六级图说明这两种情形. 六级图的图 12.6a 中共有六个拓扑不相同的图形，可由其中任何一个经顶点的循环转置得出其余五个图.

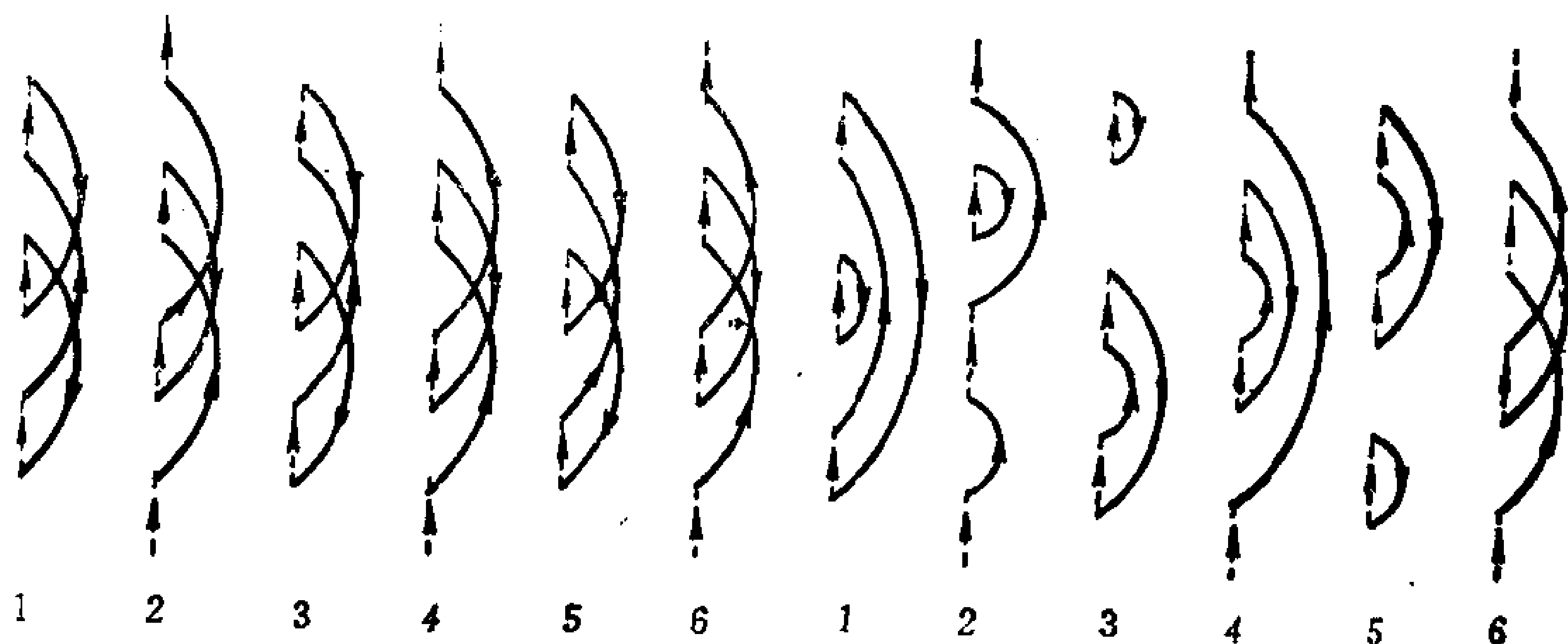


图 12.6 (a)：Anderson 杂质模型六级图之一的循环转置.
(b)：Anderson 杂质模型六级图之一的循环转置.

图 12.6(b) 中的六级图也是六个，可由其中之一经循环转置得到其余五个，但是六个图中只有二个是拓扑不等价的. 对 Z/Z_0 有贡献的应当是拓扑不等价图形. 由于由循环转置得到的拓扑不等价图形对 Z/Z_0 的贡献相同，可以只取其中一个，然后乘上图形数目，此数目对图 12.6a 和图 12.6b 分别是 $l=6$ 和 $l=2$. 一般

而言

$$\frac{Z}{Z_0}=1+\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{R_{2n}} lC(R_{2n}), \tag{12.1.50}$$

其中 $C(R_{2n})$ 表示 $2n$ 级图形族的一个代表图形的贡献，$\sum\limits_{R_{2n}}$ 表示对 $2n$ 级的不同的图形族求和.

§ 12.2 变价问题的应用[1]、[2]

一、孤立杂质情形(单杂质)

考虑到 f 能级上的电子有自旋轨道耦合，$U\to\infty$ 的 Anderson 哈密顿量，(12.1.32)式，可推广为自旋轨道简并哈密顿量

$$H=\sum_{\boldsymbol{k}m}\epsilon_{\boldsymbol{k}m}d^{+}_{\boldsymbol{k}m}d_{\boldsymbol{k}m}+\sum_{m}\epsilon_{m}f^{+}_{m}f_{m}$$
$$+\sum_{\boldsymbol{k}m}(V_{\boldsymbol{k}}d^{+}_{\boldsymbol{k}m}f_{m}+\text{h.c}), \tag{12.2.1}$$

其中 fd 杂化项未写上投影算符，但是仍然应当保持在自旋轨道耦合的态上只有一个 f 电子或者没有 f 电子占据的规定.

从图 12.3 可见图形分为连接的和不连接的. 更高级的图形也同样可以分为连接的和不连接的. 定义自能 $\Sigma_i(z)$ 为有共同初始 f 态 $|i\rangle$ 的全体连接图之和. 在公式(12.1.38)和 (12.1.47)中找出由一条虚线和一条实线所构成的闭合环——泡形图，及两个泡形图的表达式，进行比较，即可知后者的表达式比前者的多出一个泡形图表达式及 $1/z$ 因子. 不难从图解规则理解 $1/z$ 因子出现的原因，因为两个泡形图的中间有两个顶点不连接，这两个顶点之间贡献一个能量分母 z. 和(12.1.9)相应的 $\Sigma_i(z)$ 可展开为

$$Z=Z_0+Z_0\oint\frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\sum_{i=0,1}\left\{\frac{1}{z^2}P_i\Sigma_i(z)\right.$$

$$+\frac{1}{z^2}P_i\Sigma_i(z)\frac{1}{z}\Sigma_i(z)+\cdots\Big\}$$

$$=Z_0\oint\frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\sum_{i=0,1}P_i\frac{1}{z-\Sigma_i(z)}. \tag{12.2.2}$$

和(12.1.12)式相应的$\Sigma_i(z,g)$展开为

$$Z-Z_0=-\beta Z_0\int_0^1\mathrm{d}g\,\frac{1}{g}\oint\frac{\mathrm{d}z}{2\pi\mathrm{i}}\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\sum_{i=0,1}P_i\frac{\Sigma_i(z,g)}{z-\Sigma_i(z,g)}. \tag{12.2.3}$$

前面已经证明过(12.2.3)式类型的展开式中，顶点循环转置时，表达式不变．于是一个初始f态有电子占据的图形一定有一个初始f态没有电子占据的图形与之对应，两者相差一个循环转置，因为两者的表达式相等．这在二级图和四级图是可以立即核对的．考虑到这一点，可把(12.2.3)改写为更简单的形式．

$$\frac{Z}{Z_0}=1-\beta\int_0^1\frac{\mathrm{d}g}{g}\oint\frac{\mathrm{d}z}{\pi\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\beta z}P_0\frac{\Sigma_0(z,g)}{z-\Sigma_0(z,g)}. \tag{12.2.4}$$

为了做单杂质的自旋-轨道简并 Anderson 模型的 $1/N$ 展开($N=2J+1=f$ 能级简并度)，先计算如下一些低级连接图，找出它们和 $1/N$ 的关系．

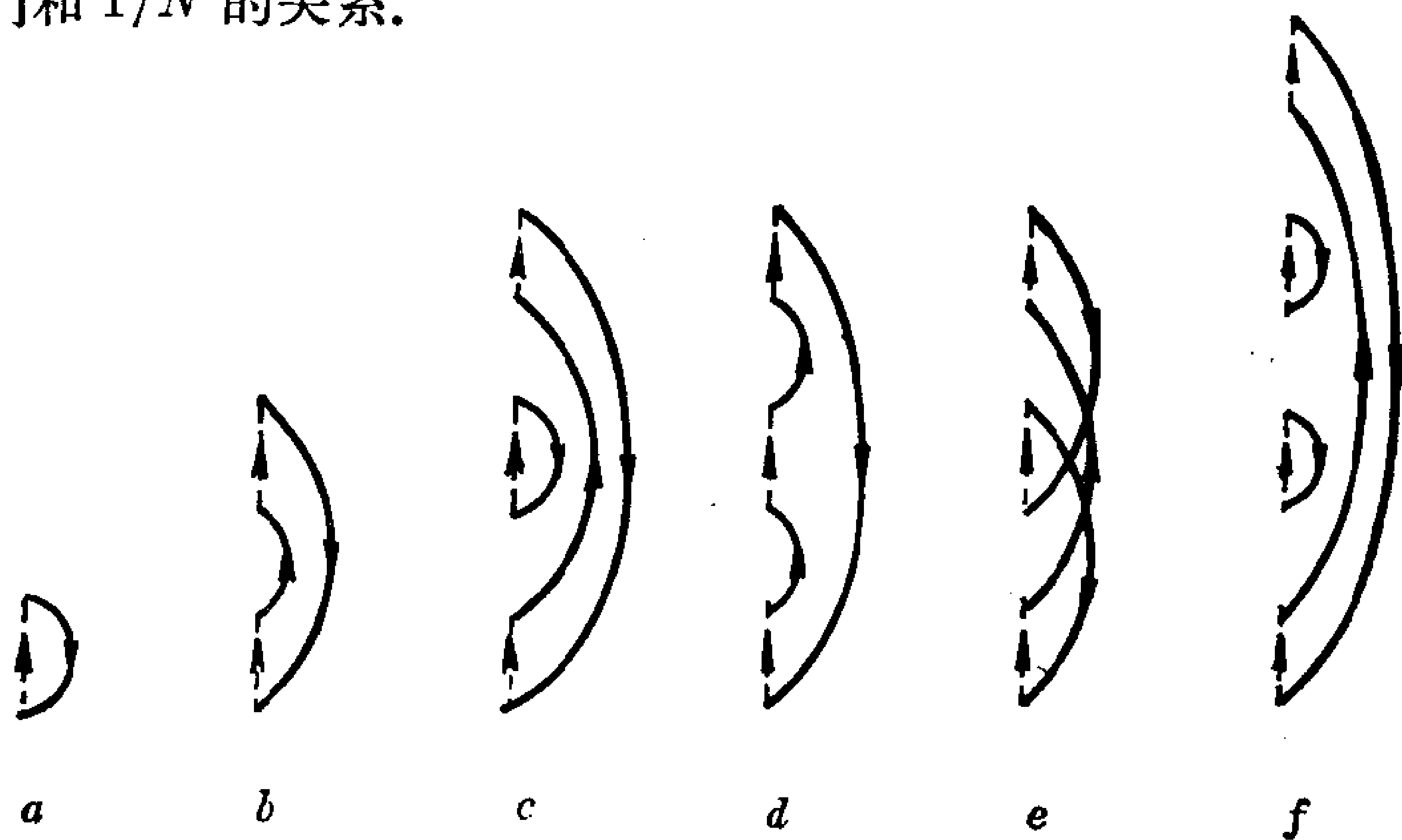


图 12.7　$\Sigma_0(z,g)$的低级图

按图解规写出表达式，在$|z|$比带宽 $2D$ 很小时，保留符号$-\beta/(\pi i)\int_0^1 dg/g \oint dz e^{-\beta z}/z$ 不动，计算出其余因子的主要贡献是（取 $E_m=0$ 和 $T=0K$, $\gamma_0=g^2N\bar{V}^2N(E_F)$)：

$$
\begin{aligned}
a&=\gamma_0\ln(z/D),\\
b&=\frac{\gamma_0}{N}\ \frac{1}{z}\ln(z/D),\\
c&=\frac{\gamma_0^3}{N^2}\cdot\frac{1}{2z^2}\ln(z/D),\\
d&=-\frac{\gamma_0^3}{N^2}\cdot\frac{1}{2z^2}\cdot\ln^2(z/D),\\
e&=\frac{\gamma_0^3}{N^2}\cdot\frac{1}{z^2}\Big[3\zeta(3)-2\zeta(2)\Big],\\
f&=\frac{\gamma_0^4}{N}\cdot\frac{1}{6z^3}\ln^2(z/D).
\end{aligned}
\qquad (12.2.5)
$$

比较 d 和 e 可见交义图贡献一般比较小．所以在现在的文献中常做非交义图近似(NCA)．但在$|E_m|\ll D$ 条件不满足时，交义图不一定比同级非交义图贡献小．a 到 f 的六个表达式中，含有 $1/N$ 的不同幂次，这可以在具体计算之前看出来．文献中常做 $1/N$ 展开．做 $1/N$ 展开时，先要假设 $N|V|^2=$常数．图 12.7 的 a 是二级图，有$|V|^2$，完成对m求和时得出 N^1，由于 $N|V|^2=$常数，所以图 12.7 的 a 的表达式和$(1/N)^0$ 有关．图 12-7 的 b 是四级图，有$|V|^4$，完成对m求和时出现 N^1，$N|V|^4=N^2|V|^4/N$，所以图 12-6 的 b 和$(1/N)^1$有关．仿此可看出其它图形的表达式和$(1/N)$的关系．和$(1/N)^0$ 成正比的连接图只有图 12.7 的 a，用 $\Sigma_{00}(z,g)$表示它．

$$
\sum\nolimits_{00}(z,g)=\sum_{km}|gV|^2\frac{f_{km}}{z+\epsilon_{km}-\epsilon_m}. \qquad (12.2.6)
$$

和$(1/N)^1$成正比的连接图有图 12-6 的 b,c，f 及更高级的图，用

$\Sigma_{01}(z,g)$表示:

$$\Sigma_{01}(z,g)=\sum_{m\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2}|gV|^4\frac{f_{\boldsymbol{k}_1m}(1-f_{\boldsymbol{k}_2m})}{[z+\epsilon_{\boldsymbol{k}_1m}-\epsilon_m]^2}\left[\frac{1}{z+\epsilon_{\boldsymbol{k}_1m}-\epsilon_{\boldsymbol{k}_2m}}\right.$$

$$\left.+\frac{\Sigma_{00}(z+\epsilon_{\boldsymbol{k}_1m}-\epsilon_{\boldsymbol{k}_2m},g)}{(z+\epsilon_{\boldsymbol{k}_1m}-\epsilon_{\boldsymbol{k}_2m})^2}+\cdots\right]$$

$$=\sum_{m\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2}|gV|^4\frac{f_{\boldsymbol{k}_1m}(1-f_{\boldsymbol{k}_2m})}{(z+\epsilon_{\boldsymbol{k}_1m}-\epsilon_m)^2}$$

$$\times\frac{1}{z+\epsilon_{\boldsymbol{k}_1m}-\epsilon_{\boldsymbol{k}_2m}-\Sigma_{00}(z+\epsilon_{\boldsymbol{k}_1m}-\epsilon_{\boldsymbol{k}2m},g)},\tag{12.2.7}$$

其中第一个等式的第二项的能量分母来自图 12-7 的 c 的从下面算起的第二和第三个顶点的贡献及第四和第五个顶点的贡献. 在 $(1/N)$近似下,$\Sigma_0(z,g)=\Sigma_{00}(z,g)+\Sigma_{01}(z,g)$. 于是(12.2.4)式可化为

$$\frac{Z}{Z_0}=1-\frac{\beta}{\pi\mathrm{i}}\int_0^1\frac{\mathrm{d}g}{g}\oint\mathrm{d}z\mathrm{e}^{-\beta z}P_0\frac{\Sigma_{00}(z,g)+\Sigma_{01}(z,g)}{z-\Sigma_{00}(z,g)-\Sigma_{01}(z,g)}$$

$$=:1-S_{\alpha}.\tag{12.2.8}$$

(12.2.9)式也可做展开,

$$\frac{Z}{Z_0}=1-\frac{\beta}{\pi\mathrm{i}}\int_0^1\frac{\mathrm{d}g}{g}\oint\mathrm{d}z\mathrm{e}^{-\beta z}P_0$$

$$\times\frac{\Sigma_{00}(z,g)+\Sigma_{01}(z,g)}{[z-\Sigma_{00}(z,g)]\left[1-\frac{\Sigma_{01}(z,g)}{z-\Sigma_{00}(z,g)}\right]}\tag{12.2.9}$$

$$=1-\frac{\beta}{\pi\mathrm{i}}\int_0^1\frac{\mathrm{d}g}{g}\oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot P_0$$

$$\times\frac{\Sigma_{00}(z,g)+\Sigma_{01}(z,g)}{z-\Sigma_{00}(z,g)}\left[1+\frac{\Sigma_{01}(z,g)}{z-\Sigma_{00}(z,g)}+\cdots\right]$$

$$\approx1-\frac{\beta}{\pi\mathrm{i}}\int_0^1\frac{\mathrm{d}g}{g}\oint\mathrm{d}z\mathrm{e}^{-\beta z}P_0\left[\frac{\Sigma_{00}(z,g)}{z-\Sigma_{00}(z,g)}\right.$$

$$+\frac{z\Sigma_{01}(z,g)}{(z-\Sigma_{00}(z,g))^2}\Big]$$

$$=:1+S_\alpha^{(0)}+{}_\alpha^{(1)} \tag{12.2.10}$$

以下计算 $S_\alpha^{(0)}$. 考虑到

$$\frac{1}{g}\ \frac{\Sigma_{00}(z,g)}{z-\Sigma_{00}(z,g)}=\frac{1}{\alpha}\left[-\frac{\partial}{\partial g}\ln(z-\Sigma_{00}(z,g)\right] \tag{12.2.11}$$

有

$$\begin{aligned}
S_\alpha^{(0)}&=P_0\frac{\beta}{2\pi\mathrm{i}}\int_0^1\mathrm{d}g\ \oint\mathrm{d}z\cdot\mathrm{e}^{-\beta z}\cdot\frac{\partial}{\partial g}[z-\Sigma_{00}(z,g)]\\
&=P_0\frac{-\beta}{2\pi\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}z\mathrm{e}^{-\beta z}[\ln z-\ln(z-\Sigma_{00}(z,1))]\\
&=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}P_0\oint\mathrm{d}z\left[\frac{\partial}{\partial z}\mathrm{e}^{-\beta z}\right][\ln z-\ln(z-\Sigma_{00}(z,1))]\\
&=\frac{-1}{2\pi\mathrm{i}}P_0\oint\mathrm{d}z\mathrm{e}^{-\beta z}\left[\frac{1}{z}-\frac{1-\frac{\partial}{\partial z}\Sigma_{00}(z,1)}{z-\Sigma_{00}(z,1)}\right]\\
&=-P_0[1-\mathrm{e}^{-\beta E_0}+\text{比 } E_0 \text{ 大的极点的贡献}]\\
&\approx-P_0[1-\mathrm{e}^{-\beta E_0}]
\end{aligned} \tag{12.2.12}$$

其中 E_0 是最小的极点. 最后一步做了低温近似. 以下计算 $S_\alpha^{(1)}$.

$$S_\alpha^{(1)}=\frac{-\beta}{\pi\mathrm{i}}\int_0^1\frac{\mathrm{d}g}{g}\oint\mathrm{d}z\mathrm{e}^{-\beta z}P_0\frac{z\Sigma_{01}(z,g)}{[z-\Sigma_{00}(z,g)]^2}. \tag{12.2.13}$$

经过一系列变换, (12.2.13)式可化为

$$S_\alpha^{(1)}=\frac{-\beta}{4\pi\mathrm{i}}P_0\oint\mathrm{d}z\mathrm{e}^{-\beta z}\sum_{k_1k_2m}|V|^4f_{k_1m}(1-f_{k_1m})$$

$$\frac{1}{(z-\epsilon_{k_1m}-\epsilon_m)^2}$$

$$\times\frac{1}{[z-\Sigma_{00}(z,1)][z+\epsilon_{k_1m}-\epsilon_{k_2m}-\Sigma_{00}(z+\epsilon_{k_1m}-\epsilon_{k_2m})]} \tag{12.2.14}$$

由(12.2.10)式可得到

$$
\begin{aligned}
\Omega^{ss}-\Omega_0^{ss} &= -T(\ln Z-\ln Z_0) \\
&\approx -\frac{1}{\beta}\left[\ln(1+S_\alpha^{(0)})+\frac{S_\alpha^{(1)}}{1+S_\alpha^{(0)}}\right].
\end{aligned} \tag{12.2.15}
$$

$(1/N)^0$ 项为

$$
\begin{aligned}
(\Omega^{ss}-\Omega_0^{ss})^{(0)} &= -T\ln(1+S_\alpha^{(0)}) \\
&= -T\ln(1-P_0+P_0 e^{-\beta E_0}) \\
&\approx -T(-\beta E_0+\ln P_0),
\end{aligned} \tag{12.2.16}
$$

其中的近似式用到 $E_0<0$ 和低温条件. 考虑到

$$
-kT\ln P_0 = T\ln\left(1+\sum_\sigma e^{-\beta\varepsilon m}\right) = -T\Omega_{0f}^{ss}, \tag{12.2.17}
$$

$$
\Omega_0^{ss} = \Omega_{0f}^{ss}+\Omega_{0\text{band}}^{ss}, \tag{12.2.18}
$$

可把(12.2.16)式化为

$$
[\Omega^{ss}-\Omega_{0\text{band}}^{ss}]^{(0)} = E_0. \tag{12.2.19}
$$

可见 E_0 的物理意义是$(1/N)^0$ 近似下，f电子对热力学势Ω的贡献. 在 E_0 中也含有$|V|^2$因子.

$(1/N)^1$项为

$$
\begin{aligned}
(\Omega^{ss}-\Omega_0^{ss})^{(1)} &= -T\frac{S_\alpha^{(1)}}{1+S_\alpha^{(0)}} \approx -T\frac{1}{P_0 e^{-\beta E_0}} \cdot \\
&\cdot \sum_{k_1 k_2 m}|V|^4 f_{k_1 m}(1-f_{k_2 m})\frac{1}{[E_0+\epsilon_{k_1 m}-\epsilon_m]^2} \cdot \\
&\cdot \frac{1}{\left[1-\frac{\partial\Sigma_{00}(z,1)}{\partial z}\right]_{z=E_0}[E_0+\epsilon_{k_1 m}-\epsilon_{k_2 m}-\Sigma_{00}(E_0+\epsilon_{k_1 m}-\epsilon_{km})]}
\end{aligned} \tag{12.2.20}
$$

最后的等式用到低温条件而且只计入了在 $z=E_0$ 和 $E_0+\epsilon_{k_1 m}-\epsilon_{k_2 m}$ 的留数. 这两个极点的留数相等.

把(12.2.20)和(12.2.19)两式代入(12.2.15)中，得到 $\Omega^{ss}-\Omega_0^{ss}$ 的表达式，可以用于求出$(1/N)^1$近似下的比热容等物理量.

例如

$$c_V=\left(\frac{\Delta Q}{\Delta T}\right)_V=T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V=-T\frac{\partial^2\Omega}{\partial T^2}=\gamma T. \qquad (12.2.21)$$

对低温比热容有

$$\gamma=-\frac{\partial^2\Omega}{\partial T^2}\bigg|_{T=0\mathrm{K}} \qquad (12.2.22)$$

用 $\Delta\gamma^{(0)}$ 表示 fd 杂化对 γ 的 $(1/N)^0$ 修正，则

$$(\Delta\gamma)^{(0)}=-\frac{\partial^2(\Omega^{ss}-\Omega_0^{ss})}{\partial T^2}\bigg|_{T=0\mathrm{K}}$$

$$=-\frac{\partial^2 E_0}{\partial T^2}\bigg|_{T=0\mathrm{K}}=\frac{\mu}{1+\mu}\ \frac{\pi^2}{3T_A}, \qquad (12.2.23)$$

其中 $\mu=N\Delta/\pi T_A$, $\Delta=|V|^2N(E_F)\pi$, $T_A=E_m-E_0>0$. 如果 E_0 很靠近 E_m，则 $(\Delta\gamma)^{(0)}\gg1$，可以解释实验上观察到的 $CeCu_2Si$ 的反常大的比热容

由于磁化率 $\chi=-\frac{\partial^2\Omega}{\partial B^2}\bigg|_{B=0}$，所以类似求 γ 的办法也可用于求出磁化率．低温下的 $(1/N)^0$ 修正是

$$(\Delta\chi)^{(0)}=\frac{\mu}{1+\mu}\ \frac{1}{T_A}\ \frac{J(J+1)}{3}g^2\mu_B. \qquad (12.2.24)$$

参 考 文 献

[1] H. Keiter, G. Morandi, *Physics Reports*, **109** (1984), 277.

[2] U. Brandt, H. Keiter, *Fu-suiliu*, *Z. Physics*, **58** (1985), 267.

习　题

1. 证明，对 $t<t_0$，$\hat{U}(t,t_0)$ 的积分方程是

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\mathrm{i}\int_t^{t_0}\mathrm{d}t'\hat{H}_1(t')\hat{U}(t',t_0)$$

及

$$\hat{U}(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{i})^n}{n!}\int_t^{t_0}\mathrm{d}t_1\cdots\int_t^{t_0}\mathrm{d}t_n\widetilde{T}[\hat{H}_1(t_1)\cdots\hat{H}_1(t_n)]$$

$\widetilde{T}$ 是反编时算符(时间最迟的算符排在右边)。

2. 证明 $\psi_\alpha(x)^{\cdot}\psi_\beta(y)^{\cdot}=0$.

3. 证明，长寿命单粒子激发的能量 ε_k 和阻尼 γ_k 是

$$\varepsilon_k=\varepsilon_k^0+\mathrm{Re}\Sigma^*(\boldsymbol{k},\varepsilon_k)$$

$$\gamma_k=\left[1-\frac{\partial\mathrm{Re}\Sigma^*(\boldsymbol{k},\omega)}{\partial\omega}\bigg|_{\omega=\varepsilon k}\right]\mathrm{Im}\Sigma^*(\boldsymbol{k},\varepsilon_k)$$

4. 用 $G^0(\boldsymbol{k},\omega)$ 的公式来自由费密子系统的分布函数 n_k^0.
5. 试求自由费密子系统的单粒子推迟及超前格林函数.
6. 试求电流密度算符的格林函数表示.
7. 证明 Poisson 求和公式(2.3.24)和(2.3.25)式.
8. 对费密子系统用(2.4.10)和(2.4.11)式求 E 和 Ω 的一级修正.
9. 证明(2.1.16)和(2.1.18)式.
10. 证明(3.2.21)式.
11. 对高密度电子气，求二级近似下电子的阻尼.
12. 推导(3.4.20)式.
13. 推导(3.5.22)式
14. 证明(5.4.5)式
15. 推导 $T=0$时电子-声子系统中声子格林函数的运动方程.
16. 推导 $T>0$ 时电子-声子系统中声子松原函数的运动方程.
17. 试求声子格林函数的谱表示.
18. 试求 $T=0$ 时电子-声子系统中电子的 2 级自能.
19. 考虑一个外势场中的自由费密子系统，微扰哈密顿量是(6.2.2)式. 用 Wick 定理推导单粒子格林函数 n 级修正项的规则.

20. 假设杂质的势 $V(\boldsymbol{p})$ = 常数，计算电子的二级自能及相应近似下的格林函数 $G(\boldsymbol{p},t)$，并讨论其物理意义.

21. 推导(6.2.22)式

22. 讨论闭路格林函数的运动方程与 Boltzmann方程的关系. 在怎样的近似下可由前者推导出 Boltzmann 方程.

23. 设想从超导基态中移去一个($\boldsymbol{k}$, ↑)态的电子，那么在这基态系统中产生了一个单激发准粒子，试求其激发能.

24. 画出 BCS 理论中的元激发谱

25. 考虑库柏对问题，写对空间及自旋波函数适当乘积的反对称总波函数如下:

$$\psi_0(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)=\left[\sum_{k>k_F} a_k \cos\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)\right](S_{+\frac{1}{2}}S_{-\frac{1}{2}}-S_{-\frac{1}{2}}S_{+\frac{1}{2}})$$

将它代入双电子系统的薛定格方程可得

$$(E-2\epsilon_k)a_k=\sum_{k'>k_F} V_{kk'}a_{k'}$$

其中 $\epsilon_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$，$m$ 为电子质量，$V_{kk'}$ 为相互作用位势 $V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$ 的矩阵元. 试证明

A. 当设

$$V_{kk'}=\begin{cases}-V, 若\ k_F\leqslant|\boldsymbol{k}|,|\boldsymbol{k}'|\leqslant k_m\\ 0, \quad 在其它情形中\end{cases}$$

时可有

$$a_k=V\frac{\sum a_{k'}}{z\epsilon_k-E}$$

B. 由此证明，在 $N(0)V\ll1$ 条件下

$$E\approx2E_F-2\hbar\omega_c e^{-2/N(0)V}$$

C. 证明库柏对的波函数与下列因子成正比

$$\sum_{k>k_F}\frac{\cos\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)}{2\xi_k+\Delta}$$

其中

$$\xi_k=\epsilon_k-E_F,\quad \Delta=2\hbar\omega_c e^{-2/N(0)V}$$

26. 试说明在 BCS 机制中 $T>0$K 时准粒子的总占有率是 $2f_k$，从而说明，$1-2f_k$ 表示保证不被准粒子占据的几率.

27. 证明(7.1.43)式、(7.1.47)式.

28. 证明(7.1.35)式可以写成下式

$$F_s=-2N(0)\int_0^\infty d\epsilon\left[\frac{2\epsilon^2+\Delta^2}{E}\right]f(\beta E)-N(0)(\hbar\omega_c)^2\left\{\left[1+\left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_c}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}-1\right\}$$

其中 $E=\sqrt{\epsilon^2+\Delta^2}$, $\beta=(k_B T)^{-1}$, $N(0)$为在费密能处态密度.

29. 证明(7.2.17)式

30. 证明(7.2.26)式、(7.2.35)式、(7.2.36)式.

31. 证明(7.3.18)式

32. 证明(7.3.29)式

33. 证明(7.5.23)式

34. 证明 Gorkov 方程(7.5.5)及(7.5.6)式具有规范不变性.

35. 试阐述祖巴列夫技术.

36. 在 Anderson 哈密顿量中若其局域化电子形成了周期性晶格排列，试写出在这种情况下 Anderson 哈密顿量的推广.

37. 证明 $\mathrm{Tr}(ABC)=\mathrm{Tr}(CAB)=\mathrm{Tr}(BCA)$.

38. 证明第八章$(A-5)$式.

39. 证明(8.2.32)式.

40. 推导(9.4.3)式

41. 说明相干势近似(CPA)的方法要点.

42. 讨论用 CPA 方法研究替代式超导合金.（参看第十章文献[6]）

43. 证明(11.1.9)式中的各个关系式.

44. 在 $f(\boldsymbol{r})=\delta(\boldsymbol{r})$及局域磁矩只有一个电子的条件下，证明(11.1.12)式的二次量子化形式是(11.1.11)

45. 计算图 12.7 的图 e 的表达式.（提示：参阅第十二章文献[2]）.

46. 用 Anderson 磁性杂质哈密顿量(12.1.33)式求出(12.1.32) 式的格林函数 G_{AB} 的图解规则.

索　引

二　画

三　画

四　画

五　画

六　画

七　画

八　画

九 画

十　画

十 一 画

十 二 画

十 三 画

十 四 画

十 五 画

十 六 画

十 七 画

[General Information]
书名=固体物理中的格林函数方法
作者=卫崇德　章立源　刘福绥
页数=511
SS号=10072324
出版日期=1992年07月第1版